MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 1: Origines de la physique quantique

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI

Introduction générale

A la fin du 19 ème siècle, la physique reposait sur deux disciplines fondamentales:
- Mécanique classique
- Electromagnétisme de Maxwell

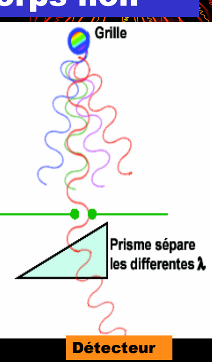
Limites de la mécanique classique (1899-1922)

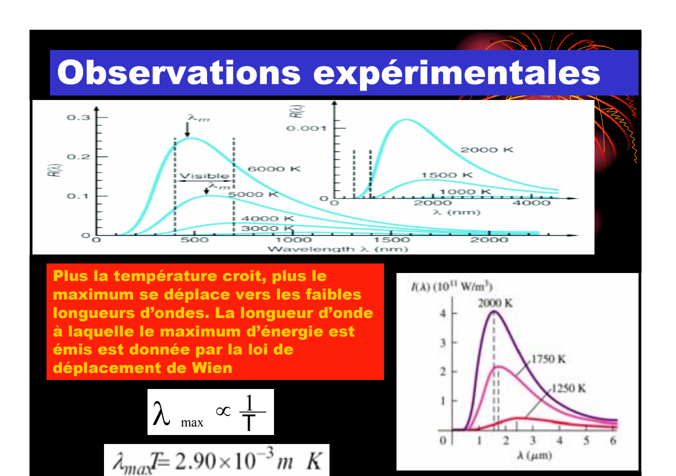
- Observations expérimentales non expliquées par la théorie classique. Donnons quelques exemples:
  - Rayonnement du corps noir
  - Effet photoélectrique
- Résolution du problème exige un changement radical de notre vision de la nature: C'est l'avènement de la Mécanique Quantique: L'art de converser avec les particules subatomiques



Rayonnement du corps noir

- Radiateur (grille) à une température T,
- Il émet une variété de λ avec des intensités différentes les unes/ autres,
- Ondes avec différentes λ dispersent différemment avec le prisme,
- Enregistrement avec un détecteur,
-Tracé de la courbe de la densité d'énergie en fonction de λ.





$$\lambda_{max} \propto \frac{1}{T}$$

$$\lambda_{max}T = 2.90\times10^{-3}\,m\ \ K$$

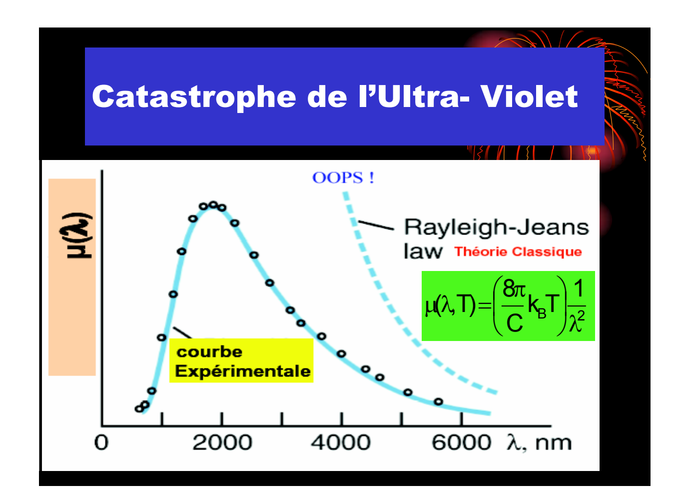
Interprétation classique de Rayleigh-Jeans:

On peut montrer par un raisonnement qualitatif que la densité d'énergie n'est fonction que de la fréquence et de la température. Elle est par exemple indépendante de la forme du corps noir.
Rayleigh- Jeans ont postulé que le rayonnement électromagnétique émis par le corps noir provient d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques qui le forment et qui ne sont autres que les atomes et molécules formant ce corps noir.

Sachant que la densité d'énergie est donnée par : μ = n <E> avec
n : nombre d'oscillations harmoniques de fréquence ν par unité de volume.
<E> : valeur moyenne de l'énergie d'un oscillateur de fréquence ν.
On montre que :

$$\mu(\nu,T) = \frac{8\pi}{C^3}\nu^2\, k_B T$$

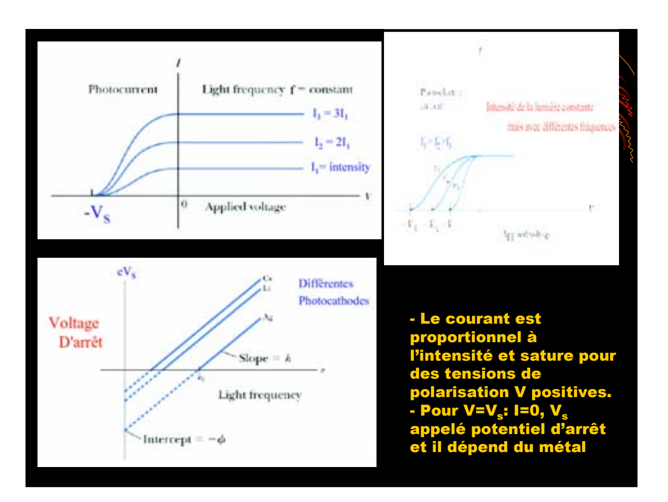
ν étant la fréquence ν =C/ λ , λ est la longueur d'onde du rayonnement, C est la vitesse de la lumière dans le vide, T est la température et K_B est la constante de Boltzmann.



Effet Photoélectrique

- Soit une ampoule en verre, vidée d'air, dont un côté de la surface interne est tapissé d'une couche d'un métal. L'ampoule contient aussi un anneau circulaire qui jouera le rôle d'anode (point de réception des électrons).
- En l'absence d'éclairement, le courant I= 0.
- Sous éclairement monochromatique de λ bien définie, LE COURANT I est non nul.
- Le courant I est crée par la lumière qui, en tombant sur le métal, arrache des électrons qui appartiennent au métal en leur fournissant l'énergie nécessaire pour franchir la barrière de potentiel qui, normalement, les retiennent à l'intérieur. Ces électrons, chargés négativement, sont captés par l'anneau (anode) et circulent dans le circuit.

vide
anode
électron
cathode
Lumière
fenêtre
transparente



Conclusions des observations expérimentales

- La lumière est une onde électromagnétique. Le champ électrique est en mesure de chasser hors du métal les électrons se trouvant près de la surface. Certains vont atteindre l'anode. La probabilité de collection augmente quand la tension appliquée croit et finit par tendre vers l'unité. Le courant atteint la valeur de saturation I_{max}.

- Dans l'image classique, le champ électrique de l'onde croit avec l'intensité de la lumière. Donc $E_{Cin,Max}$ doit croître aussi avec l'intensité. Or $E_{Cin,Max}$ est indépendante l'intensité pour une même longueur d'onde λ. Seule I_{max} dépend de l'intensité.

- Si la fréquence est inférieure à une λ_{seuil}, l'effet photoélectrique est absent. λ_{seuil} est caractéristique du métal (photocathode)

- **La physique classique est incapable d'interpréter quantitativement l'effet photoélectrique.**

Exercice:
Un rayonnement laser d'intensité 120 w/ m² éclaire le métal alcalin Na.
On suppose que l'électron est confiné dans l'atome Na d'une taille de 0.1 nm.
On a: l'énergie pour extraire un électron de Na= 2,3 eV
Combien de temps nécessite l'éjection de l'électron ?
Commenter le résultat obtenu.

Réponse:
la puissance moyenne délivrée est $P_{moy} = I \times \pi r^2$
Si toute l'énergie est absorbée : $\Delta E = P_{moy}\ \Delta T$
$\Delta T = 2{,}3 \times 1{,}6\ 10^{-19} / (120\ W/m^2) \times (3.1\ 10^{-20}\ m^2) = 0{,}10\ s$
La physique classique prévoit un temps mesurable avant le déclenchement de l'effet photoélectrique.
Par contre, l'expérience montre que le phénomène est instantanée.
C'est là un désaccord et une autre limite de la physique classique à interpréter l'effet photoélectrique.

Interprétation Quantique de Planck

- Planck a remarqué la catastrophe U.V. du RCN.
- Calcul avec de nouvelles idées a conduit à:

$R(\lambda) \rightarrow 0$ quand $\lambda \rightarrow 0$
$f \rightarrow \infty$

Planck: " Oscillateurs Chargés" dans la cavité du Corps Noir

Black Body Cavity

-Cavité en équilibre.
-Echange d'énergie entre Rayt EM et les oscillateurs présents sur les murs de la cavité

Les oscillateurs peuvent avoir n'importe quelle fréquence, MAIS l'échange d'énergie entre l'oscillateur et la radiation n'est pas continu et arbitraire. Il est discret et se fait par petits paquets de même énergie: On dit qu'i y'a quantification de l'énergie.

Planck représenta la valeur du "quantum" selon lequel s'effectue la quantification par la lettre h à laquelle on donna par la suite son nom (h: constante de Planck)

L'énergie de chaque oscillateur est donnée par:
E = hν et E ne peut pas prendre n'importe quelle valeur.

Selon cette hypothèse, on montre que :

$$\mu(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2 \; h\nu \; \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_B T}\right) - 1}$$

C'est la Loi de Planck

h = 6.6261 x 10^{-34} J s
= 4.1357 x 10^{-15} eV s

Remarques :

- Si hν << $K_B T$:

$$\mu(\nu, T) = \frac{8\pi}{c^3}\nu^2 \; k_B T$$

On retrouve la loi de Rayleigh-Jeans.

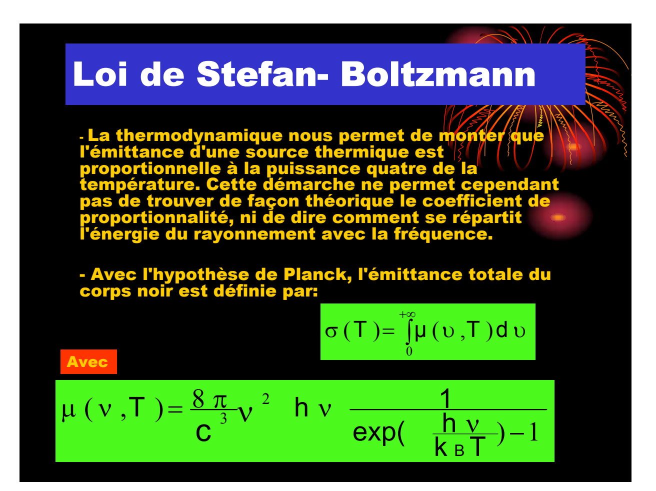
- Si hν >> $K_B T$:

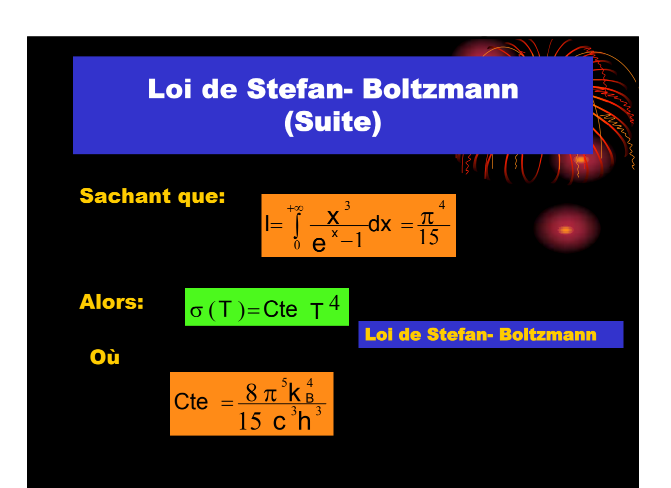
$$\mu(\nu, T) = \frac{8h\pi}{c^3}\nu^3 \; \exp\left(-\frac{h\nu}{k_B T}\right)$$

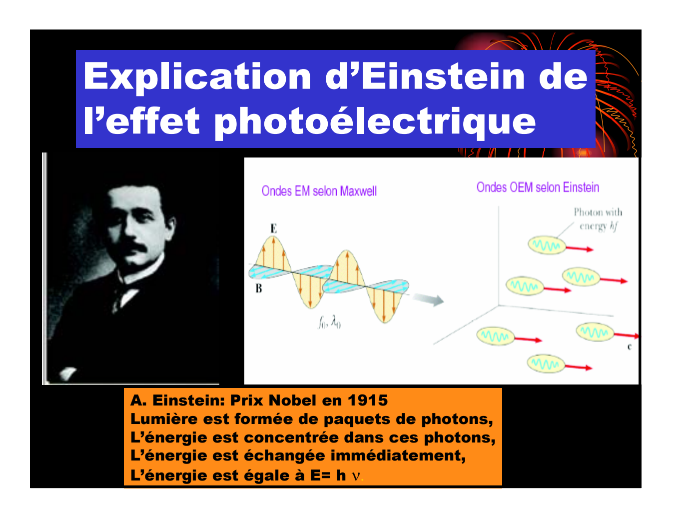
C'est la Loi de Wein

Il y'a quantification de l'énergie:

L'énergie ne peut pas prendre n'importe quelle valeur.


Loi de Stefan- Boltzmann
- La thermodynamique nous permet de monter que l'émittance d'une source thermique est proportionnelle à la puissance quatre de la température. Cette démarche ne permet cependant pas de trouver de façon théorique le coefficient de proportionnalité, ni de dire comment se répartit l'énergie du rayonnement avec la fréquence.
- Avec l'hypothèse de Planck, l'émittance totale du corps noir est définie par:
$\sigma(T)=\int_0^{+\infty}\mu(\upsilon,T)\,d\upsilon$
Avec
$\mu(\nu,T)=\frac{8\pi}{c^3}\nu^2\,h\nu\,\frac{1}{\exp(\frac{h\nu}{k_B T})-1}$


Loi de Stefan- Boltzmann (Suite)
Sachant que:
$I=\int_0^{+\infty}\frac{x^3}{e^x-1}dx=\frac{\pi^4}{15}$
Alors:
$\sigma(T)=Cte\ T^4$
Loi de Stefan- Boltzmann
Où
$Cte=\frac{8\pi^5 k_B^4}{15\,c^3 h^3}$


Explication d'Einstein de l'effet photoélectrique
Ondes EM selon Maxwell
Ondes OEM selon Einstein
Photon with energy hf
E
B
f_0, λ_0
c
A. Einstein: Prix Nobel en 1915
Lumière est formée de paquets de photons,
L'énergie est concentrée dans ces photons,
L'énergie est échangée immédiatement,
L'énergie est égale à E= h ν



Lorsqu'un photon incident de fréquence ν vient frapper une photocathode (un métal), son énergie est utilisée pour extraire l'électron du métal et lui communiquer une force vive (c à d une énergie cinétique)

L'extraction d'un électron à un métal ne peut être possible que si le photon incident à une énergie supérieure ou égale à W_E (W_E est l'énergie nécessaire pour arracher l'électron du métal).

$$W_E = h\nu_0 = \frac{hC}{\lambda_0}$$

ν_0 : fréquence seuil

λ_0: longueur d'onde seuil, dépend du métal utilisé

D'où on observe l'effet photoélectrique si $\nu_{inc} > \nu_0$; $\lambda_{inc} < \lambda_0$.

Si le photon incident communique toute son énergie à l'électron du métal :

$$h\nu = W_E + \frac{1}{2}mv^2$$

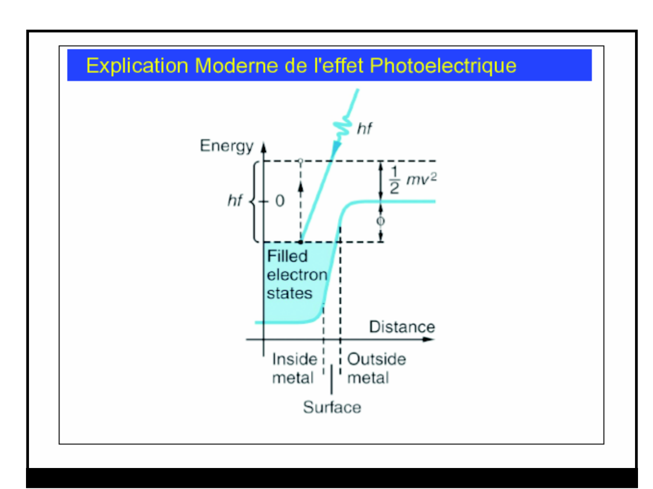
Equation de conservation de l'énergie

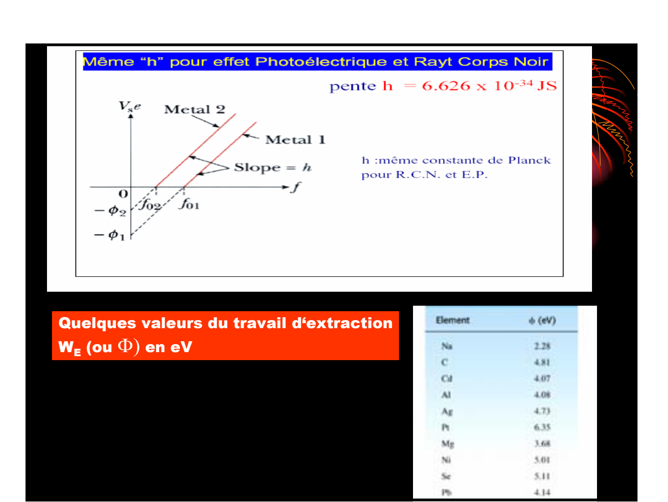
Si on applique une tension de polarité et de valeur bien définies, on peut empêcher l'arrivée des électrons à l'anode (on bloque les électrons à la surface du métal) : I=0.

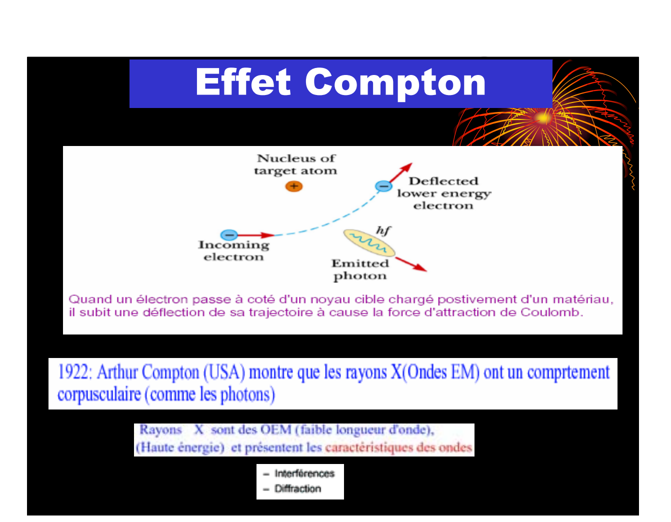
On peut alors écrire:

$$eV_s = E_{cin.\ Max}$$

V_s est appelé potentiel d'arrêt



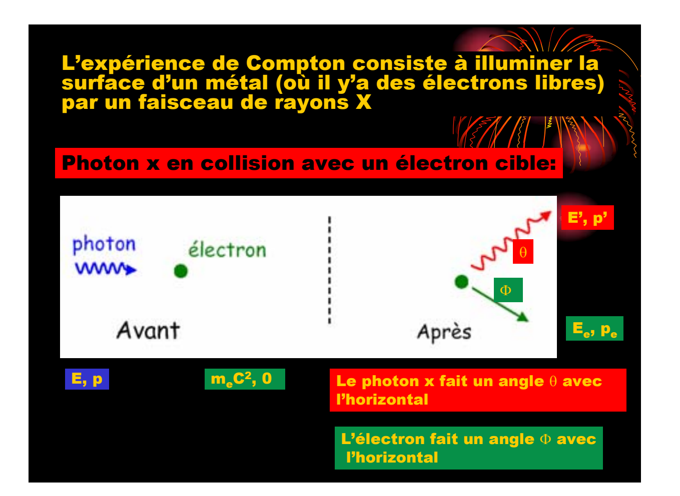




Effet Compton

Partant du principe que la lumière est constituée de véritables particules (hypothèse d'Einstein) possédant une énergie et une quantité de mouvement bien définies, Compton (physicien atomiste américain, Prix Nobel 1927) et Debye (physicien hollandais) établirent chacun de son côté la loi théorique de la diffusion de photon par l'électron.

En plus, Compton réalisa l'expérience et confirma les prédictions effectuées sur la base d'une hypothèse corpusculaire de la lumière.



Equations de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement

- Conservation de l'énergie nous donne:

$$E + m_e C^2 = E' + E_e$$

- Conservation de la quantité de mouvement ::

$$\vec{p} + \vec{0} = \vec{p}' + \vec{p}_e$$

- On a :

$$E = h\nu = \frac{hC}{\lambda}$$

$$E' = h\nu' = \frac{hC}{\lambda'}$$

Relation de Planck- Einstein

$$E_e^2 = m_e^2 C^4 + p'^2 C^2$$

Relativité restreinte

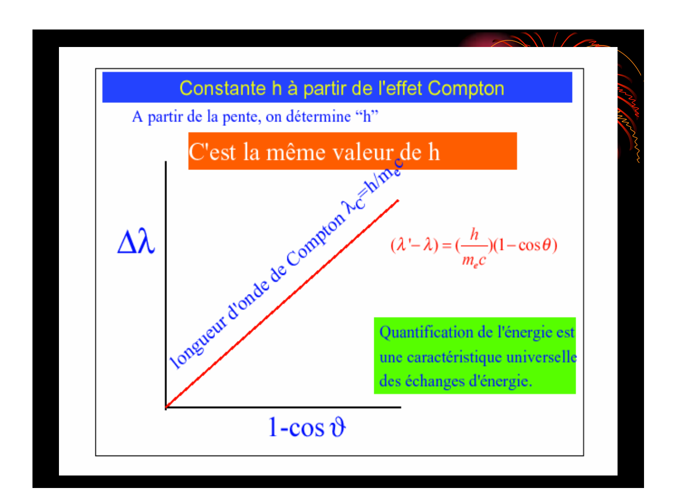
Suite du calcul

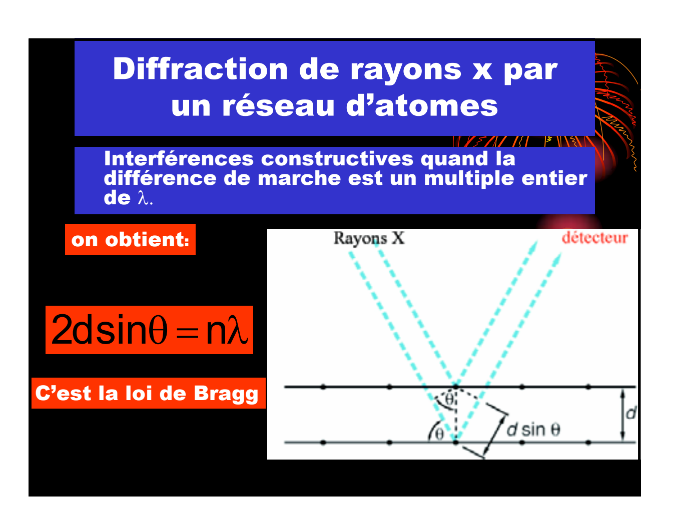
- En projetant l'équation vectorielle sur un système d'axes orthonormés, on obtient facilement:

$$p = p'\cos\theta + p_e \cos\Phi$$
$$0 = p'\sin\theta - p_e \sin\Phi$$

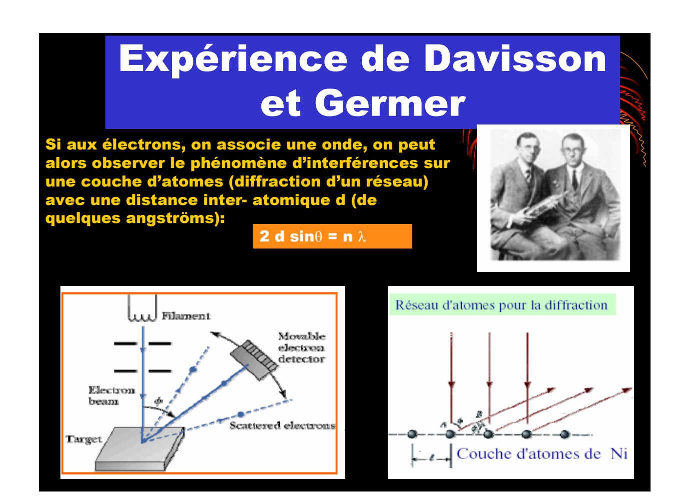
- En combinant de manière astucieuse les différentes équations (voir TD n°1), on obtient:

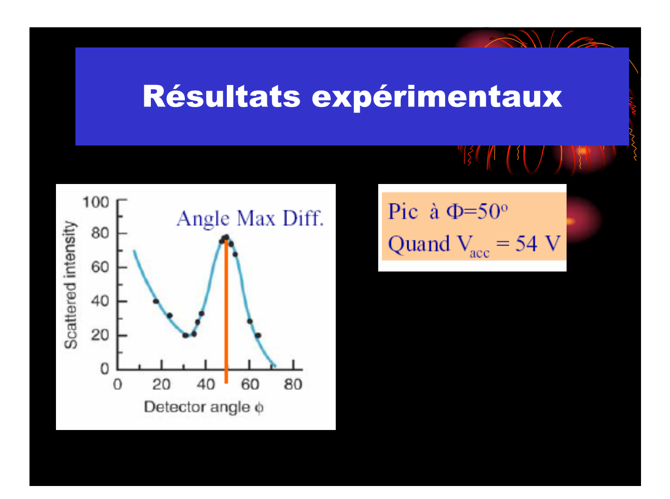
$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e C}(1 - \cos\theta)$$


Constante h à partir de l'effet Compton
A partir de la pente, on détermine "h"
C'est la même valeur de h
Δλ
longueur d'onde de Compton $\lambda_c = h/m_e c$
$(\lambda' - \lambda) = (\frac{h}{m_e c})(1 - \cos\theta)$
Quantification de l'énergie est une caractéristique universelle des échanges d'énergie.
1-cos ϑ


Diffraction de rayons x par un réseau d'atomes
Interférences constructives quand la différence de marche est un multiple entier de λ.
on obtient:
$2d\sin\theta = n\lambda$
C'est la loi de Bragg
Rayons X
détecteur
θ
θ
d sin θ
d


Les ondes de matière (Prince Louis de Broglie)
Puisque les photons ont un double aspect ondulatoire et corpusculaire, les corpuscules (corps de masse m) doivent avoir aussi ce double aspect !!!
C'est la question que s'est posé L. de Broglie
•Le photon associé à l'onde électromagnétique se déplace à la vitesse C. sa masse est alors nulle.
•Or la relativité d'Einstein nous dit que:
$E^2 = p^2C^2 + m^2C^4$
D'où : E=pC
•Comme Planck postule que E=hν, alors :
P=h/λ


Expérience de Davisson et Germer
Si aux électrons, on associe une onde, on peut alors observer le phénomène d'interférences sur une couche d'atomes (diffraction d'un réseau) avec une distance inter- atomique d (de quelques angströms):
$2\,d\,\sin\theta = n\,\lambda$
Filament
Movable electron detector
Electron beam
ϕ
Scattered electrons
Target
Réseau d'atomes pour la diffraction
Couche d'atomes de Ni


Résultats expérimentaux
Angle Max Diff.
Scattered intensity
100
80
60
40
20
0
0 20 40 60 80
Detector angle ϕ
Pic à $\Phi = 50°$
Quand $V_{acc} = 54$ V


Comme l'électron est accéléré avec une d.d.p. V_{acc}, alors son énergie cinétique est liée à V_{acc} par la relation:
$\frac{1}{2} mv^2 = eV_{acc} \Leftrightarrow v = \sqrt{\frac{2eV_{acc}}{m}}$
•La longueur d'onde de de Broglie est donnée par:
$\lambda_{théorique} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2meV_{acc}}}$
$\lambda_{théorique} = 1.67 10^{-10}$nm
•A partir de la diffraction de Bragg:
$d_{Nickel} = 2.15 10^{-10}$ nm
Calcul de λ_{exp} à partir de l'angle maximum de diffraction :
$\theta = 50°$
$\lambda_{expér.} = 2 \times 2.15 \times \sin 50 \approx 1.65 10^{-10}$nm
•On note un excellent accord entre $\lambda_{théorique}$ et $\lambda_{expér.}$

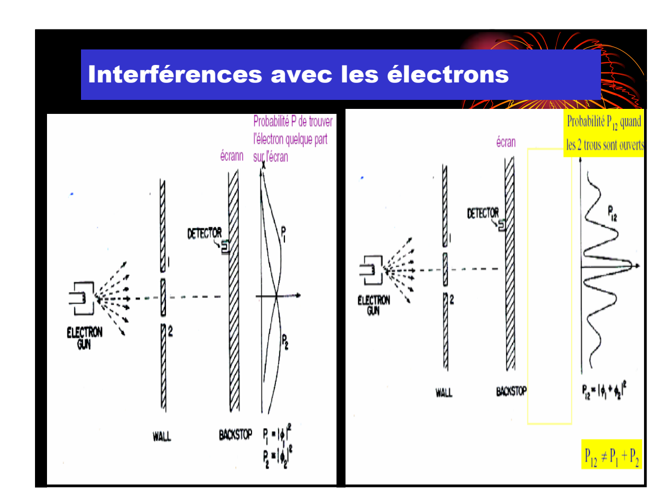
Dualité onde- corpuscule

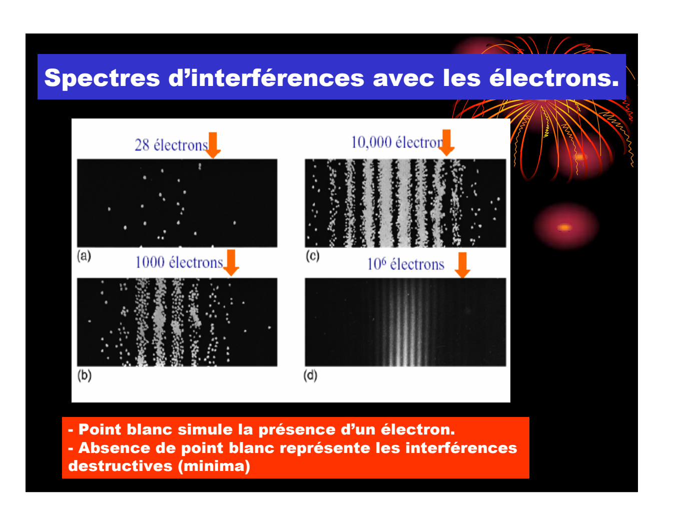
- **On a vu que :**
  - **- le rayonnement possède le double aspect ondulatoire- corpusculaire.**
  - **- la matière possède le double aspect corpusculaire- ondulatoire.**

Les objets microscopiques ont pour propriété générale de se présenter sous les deux aspects ondulatoire et corpusculaire :

C'est la dualité onde- corpuscule.

Entre les deux aspects, il existe une relation universelle de correspondance à savoir celle de Louis de Broglie.





Rappels et compléments de mathématiques

Série de Fourier

Soit une fonction f(x) définie dans l'intervalle [-L,+L] et déterminée à l'extérieur par f(2L+x)=f(x). On suppose que toutes les conditions de Dirichlet sont vérifiées.

On définit le développement de Fourier ou série de Fourier (SF) par:

$$f(x)=\frac{a_0}{2}+\sum_{n=1}^{+\infty}\left[a_n\cos\frac{n\pi x}{L}+b_n\sin\frac{n\pi x}{L}\right]$$

a_n et b_n sont appelés coefficients d Fourier:

$$a_n=\frac{1}{L}\int_{-L}^{+L}f(x)\cos\frac{n\pi x}{L}dx$$

$$b_n=\frac{1}{L}\int_{-L}^{+L}f(x)\sin\frac{n\pi x}{L}dx$$

Sous forme complexe, le développement de Fourier s'écrit:

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty}C_n e^{i\frac{n\pi x}{L}}$$

Avec

$$C_n=\frac{1}{2L}\int_{-L}^{+L}f(x)\,e^{-i\frac{n\pi x}{L}}dx$$

Relation de Parseval- Bessel

$$\frac{1}{L}\int_{-L}^{+L}\left|f(x)\right|^2=\frac{a_0^2}{2}+\sum_{n=1}^{+\infty}\left[a_n^2+b_n^2\right]$$

Transformée de Fourier

Une fonction non périodique peut-être considérée comme périodique avec une période infinie.

$$f(x)=\sum_{n=-\infty}^{+\infty} C_n e^{i\frac{n\pi x}{L}}$$

$$f(x)=\sum_{n}\left[\frac{1}{2L}\int_{-L}^{+L} f(y)\,e^{-i\frac{n\pi y}{L}}\,dy\right]e^{i\frac{n\pi x}{L}}$$

Posons:

$$\frac{n\pi}{L}=k_n$$

On peut écrire

$$\frac{1}{2L}=\frac{1}{2\pi}(k_{n+1}-k_n)$$

$$L\to\infty : \frac{1}{2L}\to 0 \text{ et } k_{n+1}-k_n=\Delta k\to dk$$

et

$$\sum\to\int \text{ et } \frac{1}{2L}\to\frac{dk}{2\pi}$$

f(x) s'écrit alors:

$$f(x)=\int_{-\infty}^{+\infty} dk\left[\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(y)\,e^{-iky}\,dy\right]e^{ikx}$$

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(y)e^{-iky}\,dy$$

C'est la transformée de Fourier de la fonction f(y) notée T.F.(f(y))

D'où

$$T.F.(f(x)) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, e^{-ikx}\, dx = F(k)$$

C'est la transformée de Fourier de la fonction f(x) notée T.F.(f(x))

Et

$$f(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k)\, e^{+ikx}\, dk = T.F.^{-1}(F(k))$$

$T.F.^{-1}$ est la T.F. inverse

Remarques

Les constantes figurant devant les intégrales (T.F. directe et T.F. inverse) n'ont aucune importance dans la mesure où leur produit est égal à $\frac{1}{2\pi}$.

Pour cette raison, nous allons choisir deux constantes égales $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ (qui répondent à la condition citée ci-dessus)

et afin d'avoir des expressions de T.F. directe et T.F. inverse symétriques. En conséquence:

$$T.F.(f(x)) = F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, e^{-ikx}\, dx$$

$$f(x)) = T.F.^{-1}(F(k)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} F(k)\, e^{+ikx} dk$$

Propriétés de la T.F.

$$T.F.(af(x)+b(g(x)) = aT.F.(f(x)) + bT.F.(g(x))$$

$$T.F.(f(ax)) = \frac{1}{|a|}F(\frac{k}{a})$$

$$T.F.(f(x-b)) = e^{-ikb}\, F(k)$$

$$T.F.(f^{(n)}(x)) = (ik)^n\, F(k)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |F(k)|^2 dk$$

Egalité de Parseval- Plantherel

Théorème de convolution

Soient deux fonctions f(x) et g(x) tq:
T.F.(f(x))=F(k) et T.F.(g(x))=G(k).

On définit le produit de convolution de f et g par :

$$h(x) = f * g = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(y)\, g(x-y)\, dy$$

On montre que: (Voir T.D. n°2)

$$T.F.(h(x)) = T.F.(f * g) = F(k)\, G(k)$$

Fonction de Dirac

Soit $\delta^{\varepsilon}(y-y_0)$ une fonction définie autour de y_0 dans un domaine de largeur ε où elle a une valeur appréciable.
Si ε tend vers zéro, δ aura une seule valeur appréciable au point $y=y_0$. En plus:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{\varepsilon}(y-y_0)\,dy = 1$$

Exemples:

$$\delta^{\varepsilon} = \begin{cases} \frac{1}{\varepsilon} \text{ si } |y - y_0| < \frac{\varepsilon}{2} \\ 0 \quad \text{ailleurs} \end{cases}$$

On a bien:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{\varepsilon}(y-y_0)\,dy = \int_{-\frac{\varepsilon}{2}}^{+\frac{\varepsilon}{2}} \frac{1}{\varepsilon}\,dy = 1$$

Propriétés de δ

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x-x_0)\,dx = f(x_0)$$

$$T.F.(\delta(x-x_0)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx}\;\delta(x-x_0)\,dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}$$

$$T.F.^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ikx}\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ikx_0}\,dk$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{+ik(x-x_0)}\,d\lambda \; = \delta(x-x_0)$$

$$T.F.(\delta(x)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

$$T.F.^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) = \delta(x)$$

$$\delta(x) = \delta(-x)$$

$$\delta(Cx) = \frac{1}{C}\delta(x)$$

MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 2:
Equation de Schrödinger

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI

Introduction

Deux formulations équivalentes de la mécanique quantique furent proposées pratiquement en même temps :

1- Mécanique des matrices d'Heisenberg- Born : consiste à associer à chaque grandeur physique une matrice. Elle est très mathématique et obéit à une algèbre non commutative .

2- Mécanique ondulatoire due à Schrödinger : basée sur les travaux de Louis de Broglie et nécessite un bagage mathématiques relativement simple (équations aux dérivées partielles).

Rappels

•a) Hypothèse de Louis de Broglie :

$(m, \vec{v}) \rightarrow \lambda$

$$E = h\nu = \frac{hC}{\lambda} = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar\omega$$

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda}\vec{u} = \frac{h}{2\pi}\frac{2\pi}{\lambda}\vec{u} = \hbar k\vec{u} = \hbar\vec{k}$$

ω est la pulsation
$\vec{k}$ est le vecteur d'onde

b) Rappels sur les équations de Maxwell, l'équation d'onde, l'onde plane monochromatique. (Voir cours d'électromagnétisme)

Fonction d'onde

- Au mouvement de toute particule, on associera une fonction $\psi(\vec{r},t)$ appelée fonction d'onde.
- $\psi(\vec{r},t)$ nous donnera toutes les informations sur l'état quantique de la particule à l'instant t. c'est en quelque sorte l'ADN de la particule.

$$(\Re^3, \Re) \rightarrow C$$
$$(\vec{r}, t) \rightarrow \psi(\vec{r}, t)$$

Onde plane monochromatique

- **A une particule libre (c.a.d une particule qui n'a comme énergie que l'énergie cinétique ou encore absence de force pour influencer son mouvement), on associe une onde plane monochromatique:**

$$\psi(\vec{r},t) = A \exp i(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)$$
$$\psi(\vec{r},t) = A\left(\cos(\vec{k}.\vec{r} - \omega t) - i\sin(\vec{k}.\vec{r} - \omega t)\right)$$

A : amplitude de l'onde plane

$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{u}$: vecteur d'onde

$\vec{u}$: caractérise la direction de propagation de l'onde

Equation de Schrödinger (Prix Nobel 1933)



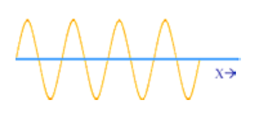
On a vu que pour une particule libre, la fonction d'onde est une onde plane monochromatique.
A une dimension, on:



$$\psi(x,t) = A \exp i(kx - \omega t)$$

$$\text{Or} : k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} = \frac{p}{\hbar}$$

$$\text{et } E = \hbar\omega \Leftrightarrow \omega = \frac{E}{\hbar}$$



La fonction d'onde devient:

$$\psi(x,t) = A \exp i(px - Et)/\hbar$$

- Dérivons la fonction ψ par rapport à x et à t, on obtient:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{-1}{i\hbar} p\,\psi$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} E\,\psi$$

Comme $E = \frac{p^2}{2m}$

Alors:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}$$

C'est l'équation de Schrödinger pour une particule libre à une dimension.

A 3 dimensions, l'équation de Schrödinger d'une particule libre est donnée par:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\vec{r},t)$$

Les cas intéressants en mécanique quantique sont ceux où la particule est soumise à une force (sous un potentiel réel V):

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

A 3 dimensions, l'équation de Schrödinger que nous Postulons, est alors donnée par:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r},t)\right)\psi(\vec{r},t)$$

En 1927, l'équation fondamentale de la mécanique quantique non relativiste (équation de propagation de l'onde représentant le système quantique) fût énoncée par Schrödinger.

Cette équation de Schrödinger va nous permettre de déterminer la fonction d'onde ψ du système étudié, son évolution et son spectre d'énergie …
Notons qu'elle est très différente de l'équation d'onde ci-dessous de l'électromagnétisme:

$$\frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \Delta\psi$$

Remarques

L'équation de Schrödinger obéit aux conditions suivantes:

- i) La solution de cette équation doit obéir à la loi de superposition, caractéristique des ondes en général.
  Si ψ_1 et ψ_2 sont solutions de l'équation d'onde, alors $a\psi_1 + b\psi_2$ l'est aussi, a et b sont des constantes.
  Par conséquent, L'équation d'onde doit être linéaire et homogène.
- ii) Si l'équation est du premier ordre en $\frac{\partial}{\partial t}$, la connaissance de ψ à t = 0 suffit pour connaître ψ à t ultérieur.
- iii) Les prévisions de cette équation d'onde doivent se raccorder avec celles de la mécanique classique.
  C'est ce qu'on appelle le principe de correspondance.
  Ceci suggère une certaine analogie entre cette équation et celle de la mécanique classique.

Densité de probabilité

Les propriétés essentielles des ondes de Louis de Broglie (on dit aussi les ondes de matière) s'obtiennent par analogie avec l'optique (ondes électromagnétiques).

Comme pour les photons nous admettrons que la valeur, en chaque point de l'espace, de l'intensité de l'onde (ou de la fonction d'onde) associée à la particule donne la probabilité de trouver la particule en ce point et à cet instant t.

Il s'agit d'une interprétation statistique de la fonction d'onde ψ (r,t). Par conséquent, on doit substituer à la notion de trajectoire (d'une particule en mécanique classique) la notion de probabilité de présence de la particule. Ainsi :

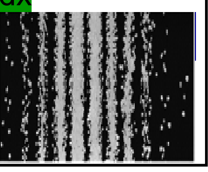
Probabilité pour que la particule soit dans l'intervalle [a,b] est donnée par l'aire de la courbe située entre a et b.

$$\int_a^b dP(x) = \int_a^b |\psi(x,t)|^2 dx$$

Il est impossible de connaître avec précision la position de la particule à un instant t. On ne peut que connaître la probabilité dP(x) pour qu'elle soit entre x et x+dx, soit:

$$dP(x) = |\psi(x,t)|^2 dx = \psi(x,t)\psi^*(x,t)\,dx$$

La distribution de l'intensité de la lumière dans un spectre de diffraction est une mesure de la probabilité pour qu'un photon frappe en un point donné.



La particule doit être quelque part sur l'axe X'OX , par conséquent:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x,t)|^2 dx = 1$$

ψ est normalisée

Ψ est de carrée sommable (car l'intégrale est finie)

Définition de la densité de probabilité (cas unidimensionnel):

$$\frac{dP(x,t)}{d^3r} = |\psi(x,t)|^2 = \rho(x,t)$$

Cas d'une particule dans l'espace

On a:

$$\int dP(\vec{r},t) = \iiint_{espace} |\psi(\vec{r},t)|^2 d^3r = 1$$

Avec

$$d^3r = dxdydz = r^2 \sin\theta \, dr d\theta d\varphi$$

Élément de volume

$$\frac{dP(\vec{r},t)}{d^3r} = |\psi(\vec{r},t)|^2 = \rho(\vec{r},t)$$

Densité de probabilité tridimensionnelle

Etude quantique d'une particule libre

On a:

$$\left.\begin{aligned} E &= \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \\ E &= h\nu = \hbar\omega \end{aligned}\right] \Leftrightarrow \omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

ω(k) est appelée relation de dispersion

Vitesse de phase v_φ

Elle est définit par $v_\varphi = \frac{\omega}{k}$. Elle représente la vitesse de propagation des plans d'ondes d'égale phase.
Rappelons qu'un plan d'onde est le plan atteint par l'onde au même instant. On a alors:

$$v_\varphi = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}$$

- **Densité de probabilité $|\psi(r,t)|^2 = A^2 = cte$:**
  Ce qui veut dire que la position de la particule est totalement indéterminée car $|\psi|^2$ est la même partout. Par conséquent on peut conclure que l'expression de $\psi(r,t)$ d'une onde plane monochromatique n'est pas adaptée à la description d'une particule localisée dans un espace restreint.
  La probabilité totale de trouver la particule est donnée par:

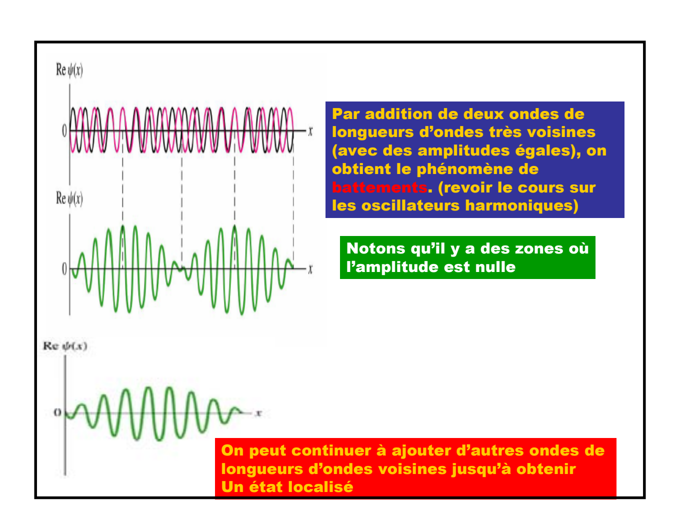
$$\int dP(\vec{r},t) = \iiint_{espace} \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = \iiint_{espace} A^2 d^3r \rightarrow \infty$$

ψ n'est pas une fonction de carré sommable.

L'onde plane monochromatique est une solution mathématique de l'équation de Schrödinger d'une particule libre, mais elle ne présente pas de Signification physique.

Solution de type Paquet d'ondes

Pour remédier à la situation ci-dessus, on introduira la notion de paquet d'ondes. Elle consiste à combiner plusieurs ondes planes monochromatiques de longueurs d'ondes voisines pour obtenir un paquet d'ondes c.a.d. une onde localisée.



Par addition de deux ondes de longueurs d'ondes très voisines (avec des amplitudes égales), on obtient le phénomène de battements. (revoir le cours sur les oscillateurs harmoniques)

Notons qu'il y a des zones où l'amplitude est nulle

On peut continuer à ajouter d'autres ondes de longueurs d'ondes voisines jusqu'à obtenir Un état localisé

La somme de 3 ondes non localisées conduit à une résultante localisée.



Définition du paquet d'ondes:

La superposition des ondes planes de vecteurs d'ondes voisins conduit à ce qu'on appelle un paquet d'ondes dont la fonction d'onde est donnée par :

$$\psi(\vec{r},t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{espace} g(\vec{k}) \exp(i\vec{k}.\vec{r} - \omega t)\, d^3k$$

g(k): poids statistique du paquet d'ondes, d^3k = dkx dky dkz = élément de volume dans l'espace des k.

Remarque:

On a:

$$\psi(\vec{r},0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{espace} g(\vec{k}) \exp i(\vec{k}.\vec{r})\, d^3k$$

$g(\vec{k})$ n'est autre que la transformée de Fourier (à 3 dimensions) de $\psi(\vec{r},0)$.

Probabilité associée à $\psi(r,0)$

On a:

$$P = \iiint_{espace} \psi(\vec{r},0)\psi^*(\vec{r},0)\, d^3r$$

Connaissant l'expression de $\psi(r,0)$, P devient:

$$P = \iiint_{espace} \left[\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{espace} g(\vec{k})\exp i\vec{k}.\vec{r}\, d^3k\right]\left[\frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint_{espace} g^*(\vec{k}')\exp -i\vec{k}'.\vec{r}\, d^3k'\right] d^3r$$

$$P = \iiint \iiint \left\{\iiint \left[\frac{1}{(2\pi)^3}\exp i(\vec{k}-\vec{k}').\vec{r}\, d^3r\right]\right\} g(\vec{k})\, g^*(\vec{k}')\, d^3k\, d^3k'$$

$$\text{Or : } \iiint \left[\frac{1}{(2\pi)^3}\exp i(\vec{k}-\vec{k}').\vec{r}\, d^3r\right] = \delta(\vec{k}-\vec{k}')$$

Il reste: $P = \iiint |g(k)|^2\, d^3k$ **Égalité de Parseval**

Vitesse de groupe V_g

Un paquet d'ondes présente un maximum central (qui représente l'interférence constructive des différentes ondes planes dont il est constitué). La vitesse de ce maximum est appelée vitesse de groupe V_g

Elle est définie par :

$$V_g = \left.\frac{d\omega}{dk}\right)_{k=k_0}$$

En d'autres termes, Vg représente la vitesse du barycentre du paquet d'ondes

Exemples :

i- Cas d'une onde lumineuse dans le vide: $V_g=V_f=C$

ii- Cas d'un électron libre non relativiste: $V_g=2V_\phi$

Evolution de la densité de probabilité en fonction du temps

L'étalement est du à la dispersion résultant du fait que la vitesse de phase de chaque onde du paquet d'ondes

Principe d'incertitude d'Heisenberg



On a vu que:

$$\psi(\vec{r},0)=\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}\iiint_{\text{espace}} g(\vec{k})\exp i(\vec{k}.\vec{r})\,d^3k$$

A une dimension:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\exp(ikx)\,dk \quad \textbf{(1)}$$

$$g(k)=\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x,0)\exp-(ikx)\,dx \quad \textbf{(2)}$$

On montre que les relations (1) et (2) sont aussi valables pour une particule non libre.

Pour décrire une particule de vitesse approximative fixe v_0, on choisira le poids statistique g(k) nul partout sauf pour des valeurs voisines de k_0 avec: $k_0=\frac{mv_0}{\hbar}$

Ensuite, on établira à partir de cet exemple le principe d'incertitude d'Heisenberg.

$$\begin{cases} g(k)=\frac{1}{2\Delta k} & \text{si } k_0-\Delta k<k<k_0+\Delta k \\ g(k)=0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

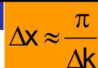
D'où:

$$\psi(x,0)=\frac{1}{(2\pi)^{1/2}}\int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k}\frac{1}{2\Delta k}\exp ikx\,dk$$

On obtient alors

$$\psi(x,0)=\frac{e^{ik_0x}}{(2\pi)^{1/2}}\frac{\sin\Delta k\,x}{\Delta k\,x}$$

On voit que:



$$\Delta x\approx\frac{\pi}{\Delta k}$$

Comme $\Delta p\approx\hbar\Delta k$

Alors: $\Delta x\,\Delta p\geq\hbar$

Cette relation traduit le principe d'incertitude d'Heisenberg

Notons, qu'il existe d'autres formes du principe d'incertitude d'Heisenberg tel que:

$$\Delta x\,\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$$

Ce qui nous intéresse est l'ordre de grandeur d'une part et la signification physique (donnée ci-dessous) de ce principe.

La relation d'Heisenberg est fondamentale en mécanique quantique. Elle traduit l'impossibilité de connaître avec précision simultanément la position et l'impulsion. Cette impossibilité n'est pas d'origine technique. En effet, quand on mesure la position d'une particule, on la perturbe en lui communiquant une impulsion.

Cette relation n'a pas d'équivalent en mécanique classique car $\hbar$ est très petite devant les grandeurs des objets macroscopiques.

Dans la relation d'Heisenberg, les variables x et p ont des rôles symétriques. Elles sont toutes les deux susceptibles d'être mesurées à un instant t.

Il existe une autre forme du principe d'incertitude d'Heisenberg donné par:

$$\Delta E \, \Delta t > \hbar$$

Cette expression de l'incertitude relie ΔE (sur la valeur de l'énergie de la particule) à un intervalle de temps Δt (caractéristique de l'évolution du système).

Notion d'opérateurs

Lorsqu'on dérive une fonction $\psi(x,t)$ par rapport au temps, on obtient une autre fonction $\varphi(x,t)$ donnée par :

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \varphi(x,t)$$

Cette équation peut être interprétée comme suit :

L'opérateur $\frac{\partial}{\partial t}$ appliqué à $\psi(x,t)$ donne $\varphi(x,t)$. Il faut que φ appartienne au même espace des fonctions d'ondes ψ.

D'une manière générale,un opérateur A appliqué à ψ donnera φ: A $\psi(x,t)$= $\varphi(x,t)$

A est dit opérateur linéaire si :
$A(a_1\psi_1 + a_2\psi_2) = a_1 (A\psi_1) + a_2 (A\psi_2) = a_1\varphi_1 + a_2\varphi_2$
où $(a_1,a_2) \in \Re^2$

Opération avec les opérateurs

i) Somme de deux opérateurs A,B :

$$(A+B)\psi(\vec{r},t) = A\psi(\vec{r},t) + B\psi(\vec{r},t) = \varphi_A(\vec{r},t) + \varphi_B(\vec{r},t)$$

ii) Multiplication d'un opérateur A par un scalaire λ :

$$A\left(\lambda\psi(\vec{r},t)\right) = \lambda\left(A\psi(\vec{r},t)\right) = \lambda\varphi_A(\vec{r},t)$$

iii) Multiplication de deux opérateurs :

$$(AB)\psi(\vec{r},t) = A\left(B\psi(\vec{r},t)\right) = A\varphi_B(\vec{r},t) = \varphi'(\vec{r},t)$$

et

$$(BA)\psi(\vec{r},t) = B\left(A\psi(\vec{r},t)\right) = B\varphi_A(\vec{r},t) = \varphi''(\vec{r},t)$$

Généralement: $\varphi'(\vec{r},t) \neq \varphi''(\vec{r},t)$

Commutateur

On définit un commutateur de deux opérateurs A,B et le note [A,B] par :

$$[A,B] = AB - BA$$

On dit que les deux opérateurs commutent si:

$$(AB)\psi(\vec{r},t) = (BA)\psi(\vec{r},t) \Leftrightarrow [A,B]\psi(\vec{r},t) = 0$$

Exemple d'opérateurs qui ne commutent pas:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, X\right] = 1$$

Remarque

On peut avoir aussi comme opérateur une fonction f : $f(\vec{r})\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t)$

Exemples

- Comme opérateurs linéaires Ex.: $\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}$ et $\frac{\partial}{\partial t}$

- Comme produit d'opérateurs Ex.: $\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ et $\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial^2}{\partial t \partial x}$

- Opérateur formé par la somme et produit d'opérateurs :

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \Delta$$

C'est l'opérateur Laplacien

- Comme fonction d'opérateur f(x). Ex.: f(x) =x

Valeur moyenne d'une grandeur physique

Soit une grandeur physique représentée par une fonction $f(\vec{r})$,soit $\psi(\vec{r},t)$ la fonction d'onde de cette particule. On définit la valeur moyenne d'une grandeur physique de f() par :

$$< f > = \frac{\iiint \psi^*(\vec{r},t)\, f(\vec{r})\, \psi(\vec{r},t)\ d^3r}{\iiint \psi^*(\vec{r},t)\, \psi(\vec{r},t)\ d^3r}$$

Si la fonction ψ est normée à l'unité:

$$< f > = \iiint \psi^*(\vec{r},t)\, f(\vec{r})\, \psi(\vec{r},t)\ d^3r$$

Ex.: La position x: $< x > = \iiint \psi^*(x,t)\, x\, \psi(x,t)\ dx$

Ex.: L'impulsion p_x: $< p_x > = \iiint \psi^*(x,t) \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t)\ dx$

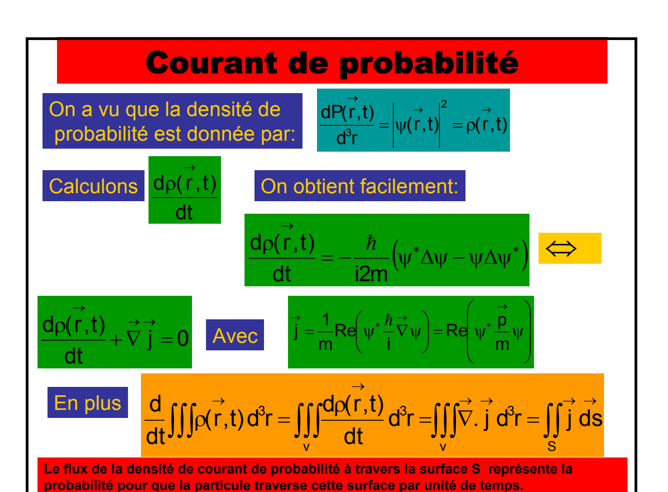
Théorème d'Ehrenfest

On montre que :

$$\frac{d}{dt}<x>=\frac{1}{m}<p_x>$$

$$\frac{d}{dt}<p_x>=-<\frac{\partial V}{\partial x}>=F$$

$\frac{d}{dt}<x>$ représente la vitesse moyenne de la particule classique et F la force moyenne agissant sur m à l'instant t.
Le théorème d'Ehrenseft établit donc la correspondance entre l'équation de Schrödinger et la mécanique classique pour une particule soumise à un potentiel V(x).



MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 3:
Solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI



On a vu que l'équation de Schrödinger dépendante du temps était donnée par:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r},t) \right)(\psi(\vec{r},t)$$

Lorsque le potentiel V est indépendant du temps V(r,t)=V(r), l'équation de Schrödinger devient:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right)\psi(\vec{r},t) = H\psi(\vec{r},t)$$

H est appelé Hamiltonien du système.
les solutions de l'équation de Schrödinger seront dites solutions stationnaires.
Le système est dit conservatif et son énergie est constante.

La fonction d'onde peut être écrite sous forme d'un produit de fonction spatiale ϕ et de fonction temporelle u: $\psi(x,t)= \phi(x)\ u(t)$

Substituons cette expression de ψ dans l'équation de Schrödinger, on obtient:

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t}\phi(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\phi(x)\, u(t)$$

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t}\frac{1}{u(t)} = \frac{1}{\phi(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\phi(x)$$

On voit qu'un terme temporel (en t) est égal à un terme spatial: ceci n'est vrai que s'ils sont tous les deux égaux à une constante. On note que cette constante a la dimension d'une énergie (h divisée par le temps, soit en joule),

On prendra cette constante égale à E.

$$i\hbar \frac{\partial u}{\partial t}\frac{1}{u(t)} = E \Leftrightarrow \frac{\partial u}{u} = \frac{1}{i\hbar}Edt \Leftrightarrow u(t) = A\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

A est une constante donnée par les conditions initiales.

La résolution de l'équation de Schrödinger se ramène à celle en $\phi(x)$.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\phi(x) = E\phi(x)$$

On obtient alors:

$$\psi(x,t) = A\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\phi(x)$$

A 3 dimensions, on obtient:

$$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{-i\frac{E}{\hbar}t}\,\phi(\vec{r})$$

Etude de quelques systèmes unidimensionnels

On se limitera à des formes de potentiel très simplifiées afin de pouvoir résoudre sans difficulté majeur l'équation de Schrödinger. Bien que les formes du potentiel que nous allons étudier soient simples, ils correspondent à des applications très importantes.

1- Saut de potentiel
2- Barrière de potentiel
3- Puits de potentiel fini en TD
4- Puits de potentiel infini
5- Particule dans une boite (3D) en TD

1- Saut de potentiel

Il est défini par:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \quad \text{région I} \\ V_0 & \text{si } x > 0 \quad \text{région II} \end{cases}$$

L'énergie E de la particule doit être positive afin que l'onde incidente soit une onde de propagation. On supposera que La particule vient du coté négatif de l'axe des abscisses x. Nous allons distinguer deux cas: x< 0 et x> 0.

A- $E > V_0$

1- x< 0: l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k_1^2\phi(x) = 0 \quad \text{où } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

L'onde incidente est représentée par le terme exp(ik_1x) et qui correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite.
Lorsque la particule arrive en x=0, elle peut soit être réfléchie, soit être transmise.
L'onde réfléchie est représentée par le terme exp($-ik_1x$).

2- x> 0: l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+V_0\phi(x)=E\phi(x)\Leftrightarrow\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+k_2^2\phi(x)=0$$

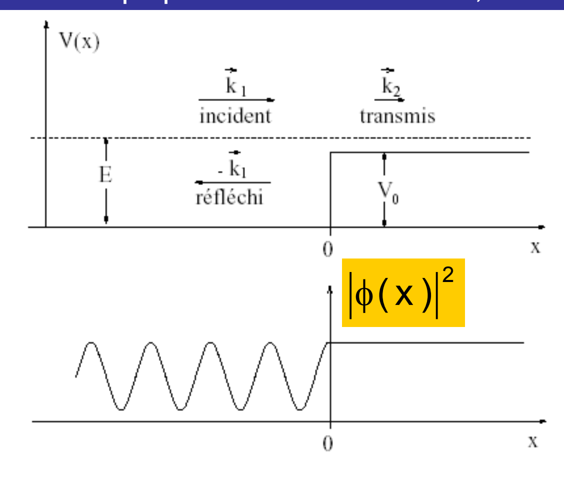
Avec:

$$k_2^2=\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$$

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_2(x)=Ce^{ik_2x}+De^{-ik_2x}$$

Le premier terme en exp(ik_2x) correspond à une onde plane allant de gauche vers la droite: il représente donc l'onde transmise.
Par contre le second terme représente une onde venant de + l'infini allant vers la gauche. Comme nous n'avons pas de particule qui provient dans ce sens, nous poserons D= 0



Remarque: L'onde incidente et l'onde réfléchie interférent comme le montre la figure précédente.

Conditions aux limites:
La fonction $\phi(x)$ et sa première dérivée $\phi'(x)$ doivent être continues en x= 0.

$$\phi(0^-) = \phi(0^+) \Leftrightarrow A + B = C$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+) \Leftrightarrow (A - B) = \frac{k_2}{k_1} C$$

On trouve:

$$B = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A \quad \text{et} \quad C = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A$$

Pour x< 0, La densité de probabilité $\rho = \phi^*(x)\ \phi(x)$ est donnée par:

$$|\phi(x)|^2 = AA^* \left[1 + \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2 + 2\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \mathrm{Cos}(2k_1 x) \right]$$

Pour x> 0, La densité de probabilité $\rho = \phi^*(x)\ \phi(x)$ est donnée par:

$$|\phi(x)|^2 = AA^* \frac{4k_1^2}{[k_1 + k_2]^2}$$

Détermination de la densité de courant de probabilité J:

$$\vec{J} = \rho\,\vec{v} = \psi^*\psi\,\frac{\vec{p}}{m}$$

$\vec{j} = \rho\vec{v}$, S, $\frac{dN}{dt} = \rho|\vec{v}|S$

Le taux de comptage dN/dt dans un détecteur de surface S exposé à un flux de particules dont la densité est j=ρ v.
ρ étant la densité des particules, v leur vitesse

Onde incidente : $J_i = \frac{\hbar k_1}{m} AA^*$

Onde réfléchie : $J_r = -\frac{\hbar k_1}{m} AA^* \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$

Onde transmise : $J_t = \frac{\hbar k_2}{m} AA^* \frac{4k_1^2}{[k_1 + k_2]^2}$

La probabilité de réflexion s'exprime par:

$$R = \left|\frac{J_r}{J_i}\right| = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$$

La probabilité de transmission s'exprime par:

$$T = \left|\frac{J_t}{J_i}\right| = \frac{4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

On remarque que: $R + T = 1$

Remarque: Dans une situation analogue en mécanique classique, la particule serait toujours transmise, alors qu'en mécanique quantique elle a une probabilité non nulle d'être réfléchie

B- $E < V_0$

1- $x < 0$: l'équation de Schrodinguer ne change pas:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = E\phi(x) \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k_1^2\phi(x) = 0 \quad \text{où } k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

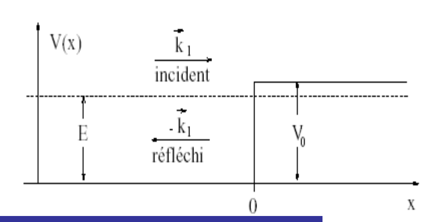
$$\phi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}$$

2- $x > 0$: l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} + k_2^2\phi(x) = 0$$

avec

$$k_2^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$



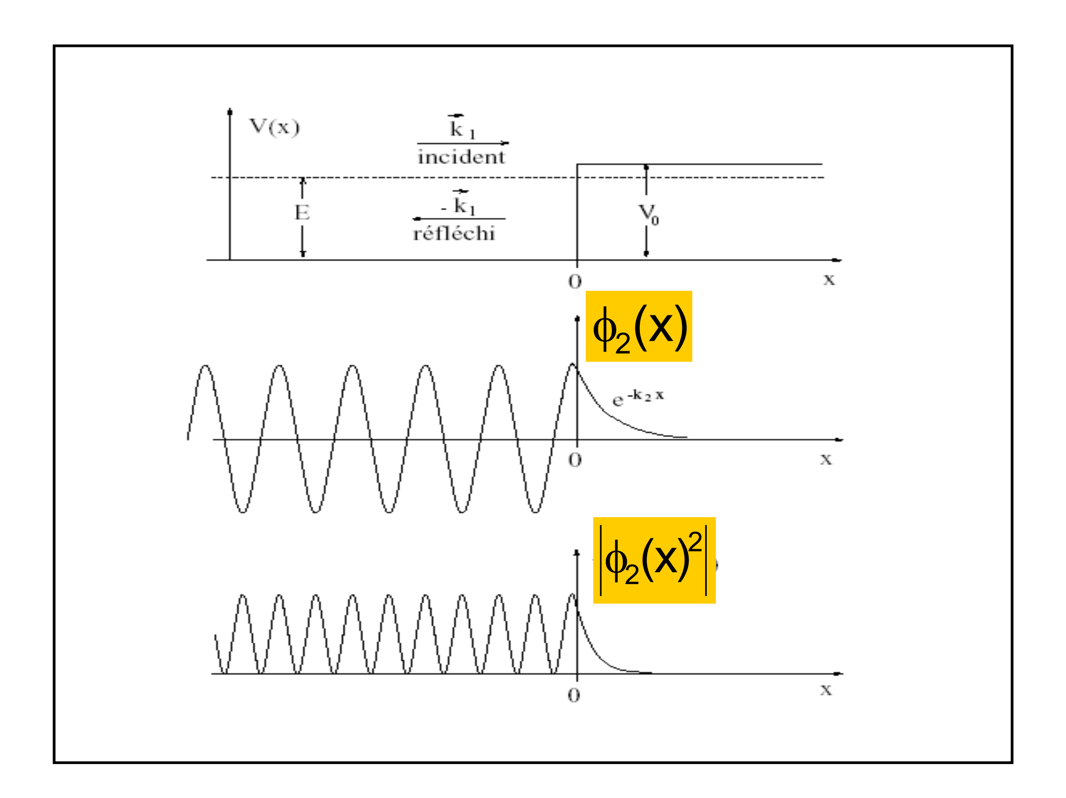
La solution générale est donnée par:

$$\phi_2(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x}$$

L'exponentielle positive diverge et ne représente donc pas une solution physique: C= 0.Il reste:

$$\phi_2(x) = De^{-k_2x}$$

ϕ_2 tend vers 0 à l'infini: C'est une onde évanescente. Il n'y a pas d'onde transmise.



Conditions aux limites:
La fonction $\phi(x)$ et sa première dérivée $\phi'(x)$ doivent être continues en x= 0.

$$\phi(0^-) = \phi(0^+) \Leftrightarrow A + B = D$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+) \Leftrightarrow (A - B) = i\frac{k_2}{k_1}D$$

On trouve:

$$A = \frac{D}{2}\frac{k_1 + ik_2}{k_1} \quad \text{et} \quad B = \frac{D}{2}\frac{k_1 - ik_2}{k_1}$$

Détermination de la densité de courant de probabilité J comme dans la première partie:

$$\vec{J} = \rho \vec{v} = \psi^* \frac{\vec{p}}{m} \psi$$

$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m} \frac{1}{4} DD^* \frac{k_1 + ik_2}{k_1} \frac{k_1 - ik_2}{k_1} \Leftrightarrow$$

$$J_i = +\frac{1}{4} DD^* \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2} \frac{\hbar k_1}{m}$$

$$J_r = -\frac{1}{4} DD^* \frac{k_1^2 + k_2^2}{k_1^2} \frac{\hbar k_1}{m}$$

On a le coefficient de réflexion R:

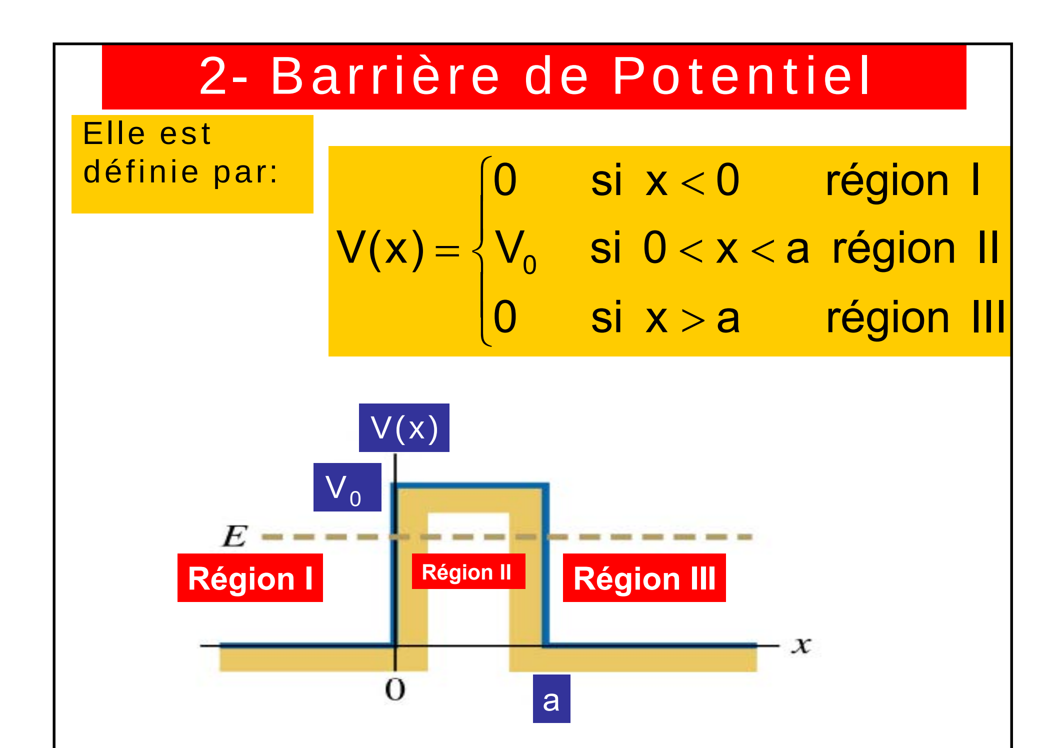
$$R = \left| \frac{J_r}{J_i} \right| = 1$$

Remarques

1- R dépend de la valeur de E par rapport à V_0

$$R = \begin{cases} 1 & \text{si } E < V_0 \\ \left(\dfrac{1 - \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{V_0}{E}}} \right)^2 & \text{Si } E > V_0 \end{cases}$$

2- Comme l'équation de Schrödinger est linéaire, la superposition de solutions du type présenté est aussi une solution. On peut alors construire une solution type paquet d'ondes, qui seront en partie réfléchies et en partie transmis.



1- x< 0 (région I): l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}=E\phi(x)\Leftrightarrow\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+k_1^2\phi(x)=0 \quad \text{où } k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_1(x)=Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x}$$

2- x> a (région III): l'équation de Schrodinguer s'écrit:

La solution générale est alors donnée par:

$$\phi_3(x)=C\,e^{ik_1x}$$

3- 0<x< a (région II): l'équation de Schrodinguer s'écrit:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+V_0\phi(x)=E\phi(x)$$

Dans cette zone 0<x< a, on distingue deux cas:

a- $E<V_0$:

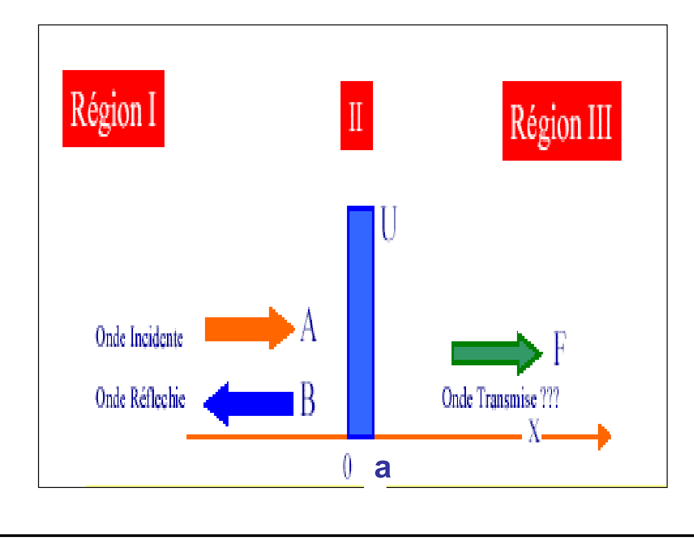
$$\phi_2(x) = Fe^{k_2 x} + Ge^{-k_2 x} \quad \text{avec } k_2 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}$$

b- $E>V_0$:

$$\phi_2(x) = Fe^{ik_3 x} + Ge^{-ik_3 x} \quad \text{avec } k_3 = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)}$$

Classiquement: si $E>U_0$, la traversée de la barrière est possible. Par contre pour $E<U_0$, il est impossible.

Qu'en est il en mécanique quantique?



Conditions aux limites:
La fonction $\phi(x)$ et sa première dérivée $\phi'(x)$ doivent être continues en x= 0 et en x=a.

$$\phi(0^-) = \phi(0^+) \quad \text{et} \quad \phi(a^-) = \phi(a^+)$$

$$\phi'(0^-) = \phi'(0^+) \quad \text{et} \quad \phi'(a^-) = \phi'(a^+)$$

On pourra ainsi déterminer les constantes B, C, F et G en fonction de A (A étant l'amplitude de l'onde incidente)

Pour déterminer cette probabilité, on calculera les densités de courant de probabilité: →

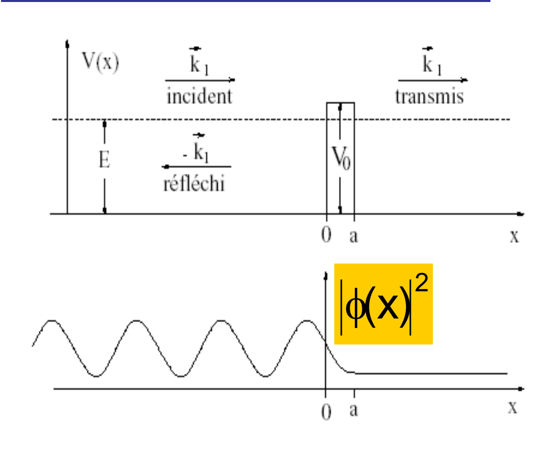
$$J_i = \frac{\hbar k_1}{m} AA^*$$

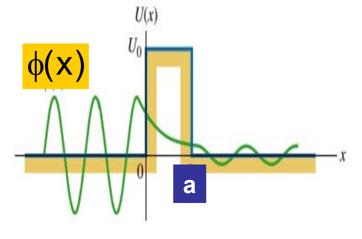
$$J_r = -\frac{\hbar k_1}{m} BB^*$$

$$J_t = \frac{\hbar k_1}{m} CC^*$$

Le coefficient de transmission T est alors donné par:

$$T = \frac{J_t}{J_i} = \frac{CC^*}{AA^*}$$





$E<V_0$:

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_2 a)}{4\frac{E}{V_0^2}(V_0 - E)} \right]^{-1}$$

$$\text{Où } k_2 a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\left(1 - \frac{E}{V_0}\right)}$$

T représente la probabilité de transmission par effet tunnel. C'est un phénomène très important en physique.(Microscope à effet tunnel, Électronique, …)

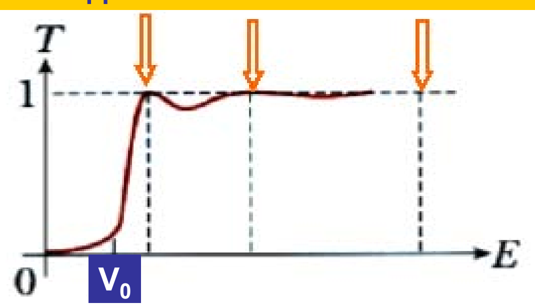
$E>V_0$:

$$T = \left[1 + \frac{\sin^2(k_3 a)}{4\frac{E}{V_0^2}(E - V_0)} \right]^{-1}$$

$$\text{Où } k_3 a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}\left(\frac{E}{V_0} - 1\right)}$$

T oscille en fonction de E et devient totale seulement pour certaines valeurs de celle-ci.

Le fait le plus remarquable est que même pour E<V0, la particule à une certaine probabilité d'être transmise. Ce qui est contraire à la physique classique.
Ce phénomène est appelé EFFET TUNNEL.



T dépend de la hauteur de barrière V_0, de sa largeur a ainsi que de l'énergie E de la particule incidente.
Pour $E>V_0$, sinh devient oscillant. Ce qui conduit à T oscillatoire aussi.
La résonance T=1 se produit seulement pour quelques valeurs d'énergie spécifiques.
Pour d'autres valeurs de E, certaines particules sont réfléchies même pour $E>V_0$: c'est là la nature ondulatoire d'une particule quantique.

Exercice: Deux fils de cuivre sont séparés par une couche d'oxyde isolante. On modélise cette couche par une hauteur de barrière égale à V_0=10 eV.

1- Estimer le coefficient de transmission dans le<cas où L'énergie incidente de l'électron est de 7 eV.

On distinguera

Les deux cas: a= 5 nm et a=1nm

couche d'oxyde isolante

Fil #1 Fil #2

Solution:

1- On utilisera la formule ci-dessous:

$$T = \left[1 + \frac{\sinh^2(k_2 a)}{4\frac{E}{V_0^2}(V_0 - E)} \right]^{-1}$$

Pour a= 5 nm: $T=0{,}963\ 10^{-38}$

Pour a= 1 nm: $T=0{,}657\ 10^{-7}$

Baisser la largeur de 5 fois, conduit à une augmentation de T de 33 ordres de grandeurs

2- Si un courant électrique de 1 mA arrive sur le fil 1, quel sera le courant à l'autre extrémité du fil 2 après avoir traversé la couche isolante d'épaisseur a= 1nm

Solution:

$$1mA = \frac{q}{t} = \frac{Ne}{t} \Leftrightarrow N = 6{,}25\,10^{13}\,\text{électrons}$$

N est le nombre d'électrons dans la zone du fil 1.
1 mA correspond au courant dû aux électrons incidents et réfléchis.

Soit Transmis le nombre d'électrons transmis.

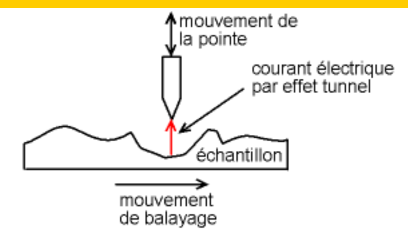
$$N_{transmis} = NT = 4{,}11\ \ 10$$

$$I_{transmis} = 65{,}7\ \text{pA}$$

Microscope à effet Tunnel

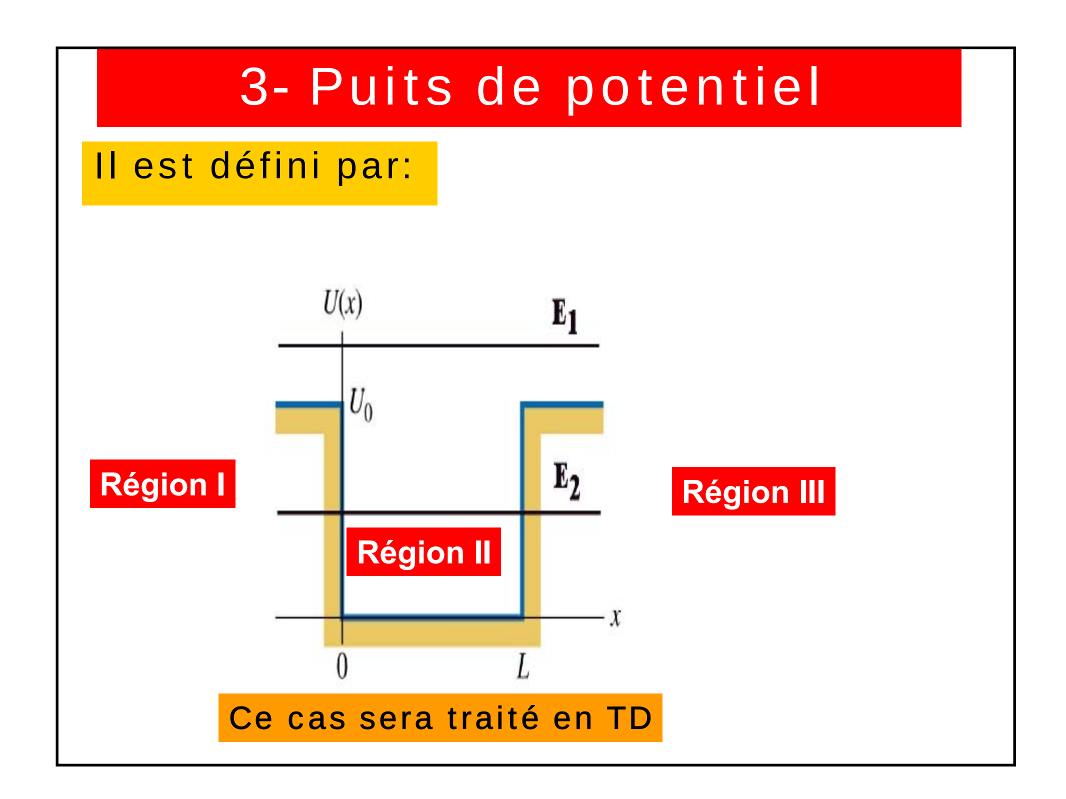
Il s'agit, pour simplifier, d'un palpeur, d'une pointe qui suit la surface de l'objet. La pointe balaie (*scanne*) la surface à représenter, un ordinateur enregistre la hauteur de la pointe, on peut ainsi reconstituer la surface.
Pour cela, avec un système de positionnement de grande précision (réalisé à l'aide de piézoélectriques),
on place **une pointe conductrice** en face de la surface à étudier et l'on mesure le courant résultant du passage d'électrons entre la pointe et la surface par effet tunnel (les électrons libres du métal sortent un peu de la surface, si l'on se met très près sans pour autant la toucher, on peut enregistrer un courant électrique). Dans la plupart des cas, ce courant dépend très rapidement (exponentiellement) de la distance séparant la pointe de la surface, avec une distance caractéristique de quelques dixièmes de nanomètres. Ainsi, on fait bouger la pointe au dessus de l'échantillon avec un mouvement de balayage et on ajuste la hauteur de celle-ci de manière à conserver une intensité du courant tunnel constante. On peut alors déterminer le profil de la surface avec une précision inférieure aux distances inter atomiques.
Mais souvenons-nous que l'on a une image de synthèse, pas une « photographie » des atomes.

(Première réalisation en 1982 par les chercheurs d'IBM- Zurich. Ces auteurs ont reçu le prix Nobel en 1986.
« STM Scanning Tunneling Microscopy »)
AFM (Atomic Force Microscopy) pour les échantillons non conducteurs.



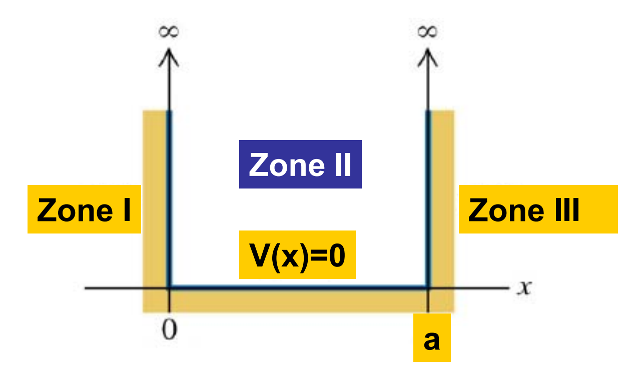
3- Puits de potentiel

Il est défini par:



Ce cas sera traité en TD

4- Puits de potentiel infini



La résolution de l'équation de schrodinger nous donne en tenant compte du fait que: $\phi(0)=\phi(a)=0$

Pour x>a et x<0, il est impossible de trouver la particule (les parois du puits sont rigides):

$$\phi_I(x)=\phi_{III}(x)=0$$

Pour 0< x <a (zone II)

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2\phi(x)}{dx^2}=E\phi(x) \qquad \Leftrightarrow \frac{d^2\phi(x)}{dx^2}+k_1^2\phi(x)=0 \quad \text{où } k_1^2=\frac{2mE}{\hbar^2}$$

La solution est:

$$\phi_{II}(x) \Leftrightarrow Ae^{ikx}+Be^{-ikx}$$

Conditions de raccordements (de continuité):

$$\phi_{II}(0)=\phi_I(0) \Leftrightarrow A+B=0$$

$$\phi_{II}(a)=\phi_{III}(a) \Leftrightarrow Ae^{ika}+Be^{-ika}=0$$

D'où

$A=-B$ et $A(e^{ika}-e^{-ika})=0 \Leftrightarrow k=\frac{n\pi}{a}$ $\quad n\in Z$

Pour 0< x <a

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$$

Énergie du nième niveau:
E est quantifiée

Fonction d'onde du nième niveau (où C=Cte de normalisation):

$$\phi_n(x) = C \sin\frac{n\pi}{L}x$$ avec $$C = \sqrt{\frac{2}{L}}$$ et $$\int_0^a \phi_n(x)\phi_m(x)dx = \delta_{nm}$$

$\phi_n(x)$ — E — $|\phi_n(x)|^2$

(a) n = 1, n = 2, n = 3, n = 4, n = 5 ; 0, L, x

(b) n = 1: E_1 ; n = 2: $4E_1$; n = 3: $9E_1$; n = 4: $16E_1$; n = 5: $25E_1$; E = 0

n = 1, n = 2, n = 3 ; 0, L, x

5- Particule dans une boite (3D)

Extension de l'étude d'une particule Dans une boite avec des murs rigides

Boite avec des murs rigides: V est infini suivant les 3 directions OX, Oy et OZ

$L_x=L_y=L_z=L$

z, z=L, y, y=0, y=L, x

V= 0 pour 0 <x,y,z < L

L’équation de Schrödinger (3D) pour un potentiel indépendant du temps.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\phi(\vec{r}) = H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

On a:

$$\vec{r} = x\,\vec{i} + y\,\vec{j} + z\,\vec{k} \quad \text{et} \quad \phi(\vec{r}) = \phi(x,y,z)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$$

$$= E_{Cx} + E_{Cy} + E_{Cz}$$

Or V= 0 pour 0 <x,y,z < L,

L’équation de Schrödinger devient

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi(\vec{r}) = H\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r})$$

Comme x,y et z sont indépendantes, on peut écrire:

$$\phi(\vec{r}) = \phi(x,y,z) = \phi_1(x)\ \phi_2(x)\ \phi_3(x)$$

En substituant dans l’équation de Schrödinger ci-dessous et en divisant par $\phi(x,y,z)$, on obtient:

$$\frac{1}{\phi_1(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_1(x)}{\partial x^2}\right) + \frac{1}{\phi_2(y)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_2(y)}{\partial y^2}\right) + \frac{1}{\phi_3(z)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_3(z)}{\partial z^2}\right) = E$$

Comme E=Constante, l'expression n'est vraie que si:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_1(x)}{\partial x^2}=E_1\phi_1(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_2(x)}{\partial x^2}=E_2\phi_2(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\phi_3(x)}{\partial x^2}=E_3\phi_3(x)$$

Avec:

$$E_1+E_2+E_3=E$$

E étant l'énergie totale du système 3D.
Chaque terme ressemble à ce qu'on a vu dans le cas d'un puits de potentiel infini. Par conséquent:

$$\phi_1(x)\propto \sin k_1x \qquad \phi_2(x)\propto \sin k_2x \qquad \phi_3(x)\propto \sin k_3x$$

Conditions de raccordement:

$$\phi_i(L)=0 \Leftrightarrow \sin k_iL=0 \Leftrightarrow k_iL=n\pi$$

avec $i=1,2$ et 3

$n\in N^*$

La quantité de mouvement 3D a pour composantes:

$$P_1=\hbar k_1=\hbar k_x=\hbar\frac{\pi}{L_x}n_1$$

$$P_2=\hbar k_2=\hbar k_y=\hbar\frac{\pi}{L_y}n_2$$

$$P_3=\hbar k_3=\hbar k_z=\hbar\frac{\pi}{L_z}n_2$$

$$n_1, n_2 \text{ et } n_3=1, 2,.....+\infty$$

L'énergie E est donnée par:

$$E=E_{n_1,n_2,n_3}$$

$$E=\frac{P^2}{2m}=\frac{1}{2m}(P_1^2+P_2^2+P_3^2)=\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}(n_1^2+n_2^2+n_3^2)$$

La fonction d'onde $\phi(x,y,z)$ est donnée par:

$$\phi(x,y,z) = A \sin k_1 x \ \sin k_2 y \ \sin k_3 z$$

Où A est la constante de normalisation.

La fonction d'onde $\psi(x,y,z)$ est donnée par:

$$\psi(x,y,z) = A \sin k_1 x \ \sin k_2 y \ \sin k_3 z \ \ e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Détermination de A:

$$\iiint_{\text{Boite}} \psi^*(x,y,z)\psi(x,y,z) \ \ dxdydz = 1$$

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2 k_1 x \ dx \ \int_0^L \sin^2 k_2 y \, dyx \ \int_0^L \sin^2 k_3 z \ dx = 1$$

On trouve:

$$A = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}}$$

$$\psi(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{\frac{3}{2}} \sin k_1 x \ \sin k_2 y \ \sin k_3 z \ \ e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

1er état (fondamental): $n_1=n_2=n_3=1$

$$E_{111} = 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = E_0$$

2 ème état (1er état excité):

$$E_{\text{1er état excité}} = 6\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} = 2\,E_0$$

C'est un état dégénéré: même énergie pour 3 états différents.

$$E_{112} = E_{121} = E_{211}$$

	n^2	Dégénérescence
$4\ E_0$	12	Pas de dégénérescence
$11/3\ E_0$	11	3
$3\ E_0$	9	3
$2\ E_0$	6	3
E_0	3	Pas de dégénérescence

MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 4 :
Formalisme mathématique de la mécanique quantique

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique



Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI

Introduction

- L'objectif de ce chapitre:
- Donner une vue d'ensemble des outils mathématiques de base utilisés en mécanique quantique.
- Regrouper les diverses notions utiles en mécanique quantique en insistant particulièrement sur la commodité des notations de Dirac.
- Connaître les notions utiles sur l'espace des fonctions d'onde,
- Comprendre le concept d'état d'un système physique et l'espace des états du système,
- Savoir utiliser les notations de Dirac et faire des manipulations sur les kets, les bras et les opérateurs.

I- Espace de fonctions d'ondes L^2

L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde $\psi(x,t)$ d'une particule a été donnée au chapitre 2.

$\iiint \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r$ représente la probabilité pour que, à l'instant t, la particule soit trouvée dans le volume $d^3r = dxdydz$ autour du point r.

la probabilité totale de trouver la particule dans tout l'espace étant égale à 1, on doit avoir :

$$\iiint_{espace} \left|\psi(\vec{r},t)\right|^2 d^3r = 1$$

Ainsi, on étudiera l'ensemble des fonctions de carré sommable pour lesquelles l'intégrale ci-dessus converge.

- Étant donné la signification attribuée à la densité de probabilité, les fonctions d'onde effectivement utilisées possèdent certaines propriétés de régularité:

- Des fonctions partout définies, continues, et même indéfiniment dérivables (par exemple, affirmer qu'une fonction est vraiment discontinue en un point donné de l'espace n'a aucun sens physique).
- Des fonctions d'onde à support borné (on est sûr que la particule se trouve dans une région finie de l'espace).

1- Définition de L^2 :

L^2 est l'espace des fonctions de carrés sommables (intégrables).

$$\Re^3, \Re^+ \to C$$
$$(\vec{r}, t) \to \psi(\vec{r}, t)$$
$$\iiint \left|\psi(\vec{r}, t)\right|^2 d^3r \quad \text{est finie}$$

2- Caractéristiques de L^2 :

L^2 a une structure d'espace vectoriel sur le corps des nombres complexes

$$\text{Si} : \psi_1 \in L^2 \quad \text{et} \quad \psi_2 \in L^2$$
$$(\lambda_1, \lambda_2) \in C^2, \text{alors} : \quad \psi = \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2 \in L^2$$

$$\psi \in L^2 \Leftrightarrow |\lambda_1|^2|\psi_1|^2 + |\lambda_2|^2|\psi_2|^2 + \lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*\psi_2 + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1\psi_2^*$$

Les 2 derniers termes $\lambda_1^*\lambda_2\psi_1^*\psi_2 + \lambda_1\lambda_2^*\psi_1\psi_2^*$ ont la même amplitude.

On peut les majorer par $|\lambda_1||\lambda_2|\left(|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2\right)$.

ψ est alors une fonction dont l'intégrale converge, puisque ψ_1 et ψ_2 sont de carré sommable.

3- Produit scalaire dans L^2 :

A tout couple de 2 fonctions ψ_1 et ψ_2 pris dans cet ordre, on associe un nombre complexe, noté (ψ_1,ψ_2):

$$\psi_1 \in L^2 \text{ et } \psi_2 \in L^2$$

$$(\psi_1, \psi_2) = \iiint \psi_1^*(\vec{r},t)\,\psi_2(\vec{r},t)\,d^3r$$

Propriétés du produit scalaire:

$$(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1)^*$$

$$(\psi, \psi) > 0. \quad \text{Si } (\psi, \psi) = 0 \text{ alors } \psi = 0$$

$$(\lambda_1\psi_1, \lambda_2\psi_2 + \lambda_3\psi_3) = \lambda_1^*\lambda_2(\psi_1, \psi_2) + \lambda_1^*\lambda_3(\psi_1, \psi_3)$$

$$(\psi_1, \psi_2) = (\psi_2, \psi_1) = 0 : \psi_1 \text{ et } \psi_2 \text{ sont orthogonales}$$

$$(\psi_i, \psi_i) = 1 : \psi_i \text{ est normée}$$

L^2 muni du produit scalaire défini comme ci-dessus a une structure d'espace d'Hilbert.

II- Opérateurs linéaires:

- Un opérateur linéaire A est, par définition, un être mathématique qui, à toute fonction ψ appartenant à L^2, fait correspondre une autre fonction de L^2 notée φ, la correspondance étant linéaire :

$$A\psi(\vec{r},t) = \varphi(\vec{r},t) \text{ avec } \psi \in L^2 \text{ et } \varphi \in L^2$$

On a aussi: $A(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(A\psi_1) + \lambda_2(A\psi_2)$

Exemples:

1- Opérateur parité $A=\pi$: $\pi\psi(x,y,z) = \psi(-x,-y,-z)$

2- Opérateur multiplication par x, que nous désignerons par X:

$$X\psi(x,y,z) = x\psi(x,y,z)$$

3- Opérateur dérivation par rapport à x: $D_x\psi(x,y,z) = \dfrac{\partial\psi(x,y,z)}{\partial x}$

Des opérateurs comme X et D_x, agissant sur une fonction ψ de L^2, peuvent la transformer en une fonction qui n'est plus nécessairement de carré sommable.

Produit d'opérateurs:

Soient deux opérateurs linéaires A et B. leur produit AB Est défini par:

$$AB\,\psi(\vec{r},t) = A(B\,\psi(\vec{r},t)) = A\varphi(\vec{r},t)$$

On fait d'abord agir B sur ψ, ce qui nous donne une fonction φ, ensuite A sur la fonction φ.

En général:

$$AB\,\psi(\vec{r},t) \neq BA\,\psi(\vec{r},t))$$

On définit le commutateur [A,B] par: [A,B]=AB - BA

Exemple:

$$[X,P_x] = \left[X,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}\left[X,\frac{\partial}{\partial x}\right] = \frac{\hbar}{i}[X,D_x] = \frac{\hbar}{i}x - 1 = i\hbar$$

III- Bases orthonormées complètes de L^2

Suivant les cas, on aura à utiliser soit une base à indice discret, soit une base à indice continu.

a) Cas d'une base discrète :

Soit $U_i(x)$ un ensemble de fonctions appartenant à L^2 où i = 1,2,…n. n peut être fini ou infini.

i) L'ensemble des $U_i(x)$ est dit orthonormé si :

$$\left(u_i(x),u_j(x)\right) = \int u_i^*(x),u_j(x)\;dx = \delta_{ij}$$

Relation d'orthonormalisation

On rappelle que:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i=j \\ 0 & \text{si } i\neq j \end{cases}$$

ii) L'ensemble des $U_i(x)$ est dit complet si :

$$\forall\, \psi \in L^2 : \psi(x) = \sum_i c_i\,u_i(x) \quad \text{avec } c_i \in C$$

ψ se décompose suivant les $U_i(x)$ de manière unique.
Cherchons l'expression de C_i. Projetons $\psi(x)$ sur $U_j(x)$, c'est-à-dire :

$$\left(u_j(x),\psi(x)\right)=\int u_j^*(x)\,\psi(x)\;dx=\int u_j^*(x)\sum_i c_i u_i(x)\;dx$$

$$\left(u_j(x),\psi(x)\right)=\sum_i c_i\int u_j^*(x)\,u_i(x)\,dx\;=\sum_i c_i\;\delta_{ij}=c_j$$

iii) Relation de fermeture :

On a:

$$\psi(x)=\sum_i\int u_i^*(x')\,\psi(x')\,u_i(x)\,dx'=\int\psi(x')\left[\sum u_i^*(x')\;u_i(x)\right]dx'$$

Par conséquent, on a: $\sum_i u_i^*(x')\;u_i(x)=\delta(x-x')$

C'est la relation de fermeture

La relation de fermeture signifie que $\psi(x)$ se décompose de manière unique suivant la base des $U_i(x)$.

$$\psi_1\in L^2\;\;\text{et}\;\psi_2\in L^2$$

$$\psi_1=\sum_i a_i\;u_i(x):\psi_1^*=\sum_i a_i^*\;u_i^*(x)\;\;\text{et}\;\;\psi_2=\sum_i b_j\;u_j(x):$$

Calculons le produit scalaire (ψ_1,ψ_2)

$$(\psi_1,\psi_2)=\int_{-\infty}^{+\infty}\sum_i a_i^*\;u_i^*(x)\sum_j b_j\;u_j(x)\;dx$$

$$(\psi_1,\psi_2)=\sum_i\sum_j a_i^* b_j\int_{-\infty}^{+\infty}u_i^*(x)u_j(x)\;dx=\sum_i\sum_j a_i^* b_j\delta_{ij}$$

$$(\psi_1,\psi_2)=\sum_i a_i^* b_i$$

b) Cas d'une base continue :

Soit $v_\alpha(x)$ un ensemble de fonctions repéré par indice a continu $\alpha \in \Re$

L'ensemble des $v_\alpha(x)$ forme une base si :

i) L'ensemble des $v_\alpha(x)$ est dit orthonormé si :

$$(v_\alpha(x), v_\beta(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^*(x) v_\beta(x)\ dx = \delta(\alpha - \beta)$$

ii) Relation de fermeture:

$$(v_\alpha(x), v_\alpha(x')) = \int_{-\infty}^{+\infty} v_\alpha^*(x) v_\alpha(x')\ d\alpha = \delta(x - x')$$

Remarque : $(v_\alpha(x), v_\alpha(x')) = \delta(0) = \infty$

Même si $v_\alpha(x)$ $\notin L^2$ on peut décomposer ψ $\in L^2$ suivant cette base:

$$\psi(x) = \int c(\alpha)\, v_\alpha(x) dx \quad \text{où} \quad c(\alpha) = (v_\alpha(x), \psi(x))$$

$C(\alpha)$ n'est autre que la composante de $\psi(x)$ suivant $v_\alpha(x)$.

iii) **Produit scalaire** :

$$\psi_1 \in L^2 \ \text{ et } \psi_2 \in L^2$$

$$\psi_1(x) = \int a(\alpha)\, v_\alpha(x)\, d\alpha : \psi_1^*(x) = \int a^*(\alpha)\, v_\alpha^*(x)\, d\alpha$$

$$\text{et } \ \psi_2(x) = \int b(\beta)\, v_\beta(x)\, d\beta$$

$$(\psi_1,\psi_2)=\int_x\int_\alpha\int_\beta a^*(\alpha)\,v_\alpha^*(x)\,d\alpha\;\; b(\beta)\,v_\beta(x)\,d\beta\;\; dx$$

$$\Leftrightarrow(\psi_1,\psi_2)=\int_\alpha\int_\beta a^*(\alpha)\,b(\beta)\,\delta(\alpha-\beta)\,d\alpha\,d\beta$$

$$\Leftrightarrow(\psi_1,\psi_2)=\int_\alpha a^*(\alpha)\,b(\alpha)\,d\alpha$$

Cas où $\psi_1=\psi_2$:

$$(\psi_1,\psi_1)=\int_\alpha a^*(\alpha)\,a(\alpha)\,d\alpha=\int|a(\alpha)|^2 d\alpha$$

Exemples de bases continues :

i) Base continue de Fourier - Base des ondes planes:

$$v_p(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

Exercice: vérifier les relations d'orthonormalisation et de Fermeture?

Par conséquent, quelle que soit $\psi(x)$ appartenant à L^2, on peut la décomposer en une combinaison d'ondes planes.

$$\psi(x)=\int c(p)\,v_p(x)\,dp=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int c(p)\,e^{\frac{i}{\hbar}px}\,dp$$

C(p) n'est autre que la T.F.($\psi(x)$):

$$c(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\psi(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}px}\,dx$$

Base continue de Fourier à 3 dimensions

$$v_p(\vec{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}.\vec{r}}$$

$$\iiint v_p^*(\vec{r}) v_{p'}(\vec{r})\ d^3r = \delta(\vec{p} - \vec{p}')$$

$$\iiint v_p^*(\vec{r}) v_p(\vec{r}')\ d^3p = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$\psi(\vec{r}) = \iiint c(\vec{p})\, v_p(\vec{r})\, d^3p$$

$$c(\vec{p}) = \iiint v_p^*(\vec{r})\, \psi(\vec{r})\ d^3r$$

ii) Base de Dirac: $v_\alpha(x) = \delta_y(x) = \delta(y - x)$

On vérifie aisément les relations d'orthonormalisation et de fermeture. Par conséquent, quelle que soit $\psi(x)$ appartenant à L^2, on peut la décomposer en une combinaison de « fonction » de Dirac.

$$\psi(x) = \int c(y)\, \delta(y - x)\, dy$$

Une fonction d'onde $\psi(x)$ représentant un état physique doit Appartenir à L^2. $\psi \in L^2$

On définit une représentation par le choix d'une base orthonormée et complète sur laquelle on développera la fonction d'onde ψ.
Cette base peut être soit à indice discret, soit à indice continu.

IV- Notation de Dirac

- **Introduction**

Nous avons reporté dans le paragraphe III qu'une même fonction peut être représenté par plusieurs ensembles distincts de composantes, correspondant chacun au choix d'une base.

Nous nous trouvons alors dans une situation analogue à celle que l'on connaît bien pour l'espace ordinaire R^3.

Banach, Fréchet et Hilbert ont eu l'idée d'employer un langage géométrique pour résoudre des problèmes d'analyse en considérant des fonctions comme des vecteurs appartenant à des espaces appropriés (abstraits).

De ce fait, **Dirac** a transposé cette idée aux fonctions $\psi(x)$: tout état quantique d'une particule sera caractérisé par un vecteur d'état appartenant à un espace abstrait ξ, appelé espace des états d'une particule.

En réalité, l'introduction des vecteurs d'état et de l'espace des états n'apporte pas seulement une simplification du formalisme. Elle permet aussi sa généralisation.

En effet, il existe des systèmes physiques dont la description quantique ne peut pas se faire à partir d'une fonction d'onde: Nous verrons que c'est le cas, même si l'on a affaire à une seule particule, lorsque l'on tient compte des degrés de liberté de **spin**.

Nous allons donc, dans le reste de ce chapitre, développer le calcul vectoriel dans ξ. Les notions que nous allons introduire et les résultats que nous obtiendrons sont valables quel que soit le système physique considéré.

Vecteur ket et espace des états

- on a vu que :

- $C_i = (U_i(x), \psi(x))$ base discrète
- $C(\alpha) = (v_\alpha(x), \psi(x))$ base continue

Ceci est analogue à la représentation d'un vecteur usuel suivant une base, par exemple $\vec{V}.\vec{i} = V_x$

Un élément quelconque, ou vecteur, de l'espace ξ est appelé vecteur ket, ou plus simplement ket. On le note par le symbole $|\ \rangle$ en mettant à l'intérieur un signe distinctif permettant de caractériser le ket correspondant par rapport à tous les autres, par exemple : $|\psi\rangle$

Maintenant, nous allons définir l'espace ξ_r des états d'une particule en associant à toute fonction d'onde de carré sommable $\psi(\vec{r},t) \in L^2$ un vecteur ket $|\psi\rangle \in \xi_r$

En résumé: $\psi(\vec{r},t) \in L^2 \Leftrightarrow |\psi\rangle \in \xi_r$

Nous désignerons par ξ_x l'espace des états d'une particule (sans spin) à une seule dimension, correspondant à des fonctions d'onde dépendant de la seule variable x.

Insistons sur le fait qu'il n'apparaît plus dans $|\psi\rangle$ de dépendance par rapport à $\vec{r}$ mais seulement la lettre ψ qui rappelle à quelle fonction il est associé :

$\psi(\vec{r})$ sera interprétée comme l'ensemble des composantes de $|\psi\rangle$

Par convention |ψ> sera représenté par une matrice (ou vecteu colonne) contenant les composantes de |ψ> dans la base correspondante. Par exemple:

$$\psi(x) = \sum_i c_i\, u_i(x) \rightarrow |\psi\rangle = \sum_i c_i\, |u_i\rangle \quad \text{avec } i \in N^*$$

$$\psi(x) = \int c(\alpha)\, v_\alpha(x)\, d\alpha \rightarrow |\psi\rangle = \int c_\alpha\, |\alpha\rangle\, d\alpha \quad \text{avec } \alpha \in \Re$$

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ . \\ c_n \\ . \end{pmatrix} \qquad |\psi\rangle = \begin{pmatrix} c(\alpha^1) \\ c(\alpha^2) \\ . \\ . \\ c(\alpha^n) \\ . \end{pmatrix}$$

Base discrète B.D. — Base continue B.C.

Vecteur bra et l'espace dual des états

- A tout vecteur ket |ψ> de ξ , on associera un vecteur dit vecteur bra, noté <ψ| appartenant à un espace appelé espace dual de ξ et qu'on note ξ*.

  Là les composantes du vecteur bra seront représentées par une matrice ligne contenant les composantes conjuguées des coordonnées de |ψ>.

$$\langle\psi| = (c_1^*, c_2^*, .., c_n^*, ..) \qquad \langle\psi| = (c^*(\alpha^1), c^*(\alpha^2), .. c^*(\alpha^n), ..)$$

B.D. — **B.C.**

<ψ| et |ψ> sont adjoints l'un de l'autre, ou encore <ψ| est le transposé conjugué de |ψ> et vis versa.

Remarque: En anglais, le symbole < | > est appelée « bracket » (c'est-à-dire crochet), d'où l'appellation Bra pour la partie gauche et< | , et ket pour la partie droite | >.

Correspondance entre |ψ> et <ψ|

Soit $\lambda \in C$,

$$|\psi\rangle \in \xi \rightarrow \langle\psi| \in \xi^*$$

$$\lambda|\psi\rangle \in \xi \rightarrow \langle\psi|\lambda^* \in \xi^*$$

$$\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle \in \xi \rightarrow \langle\psi_1|\lambda_1^* + \langle\psi_2|\lambda_2^* \in \xi^*$$

Produit scalaire en notation de Dirac

- Le produit scalaire de kets $|\psi_1>$ par $|\psi_2>$ est noté par: $\langle\psi_2|\psi_1\rangle$

Propriétés du produit scalaire:

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle^*$$

$$\langle\psi|\psi\rangle > 0. \quad \text{Si } \langle\psi|\psi\rangle = 0 \text{ alors } |\psi\rangle = 0$$

$$\langle\lambda_1\psi_1|\lambda_2\psi_2 + \lambda_3\psi_3\rangle = \lambda_1^*\lambda_2\langle\psi_1|\psi_2\rangle + \lambda_1^*\lambda_3\langle\psi_1|\psi_3\rangle$$

$$\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 : |\psi_1\rangle \text{ et } |\psi_2\rangle \text{ sont orthogonales}$$

$$\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1 : |\psi_i\rangle \text{ est normée}$$

Choix d'une représentation

- Choisir une représentation, c'est choisir une base orthonormée, discrète ou continue, dans l'espace des états ξ.
- Les vecteurs et opérateurs sont alors représentés dans cette base par des **nombres** : composantes pour les vecteurs, éléments de matrice pour les opérateurs.
- Le calcul vectoriel devient alors le calcul matriciel sur ces nombres.
- Le choix d'une représentation est en principe arbitraire. Dans chaque cas, on l'effectue de façon à simplifier au maximum les calculs.

Relations d'orthonormalisation en notation de Dirac

- Un ensemble discret $\{|u_i\rangle\}$, ou continu $\{|v_\alpha\rangle\}$, de kets est dit **orthonormé** si les kets de cet ensemble satisfont à la relation d'orthonormalisation:

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle v_\alpha | v_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$$

On note que $\langle v_\alpha | v_\alpha \rangle$ n'existe pas. Les $\{|v_\alpha\rangle\}$ ont une norme infinie et n'appartiennent donc pas à ξ.

Relations de fermeture en notation de Dirac- cas discret

- Un ensemble discret $\{|u_i>\}$de kets constitue une base si tout ket $|\psi>$ de ξ, peut être développé d'une façon et d'une seule suivant les $\{|u_i>\}$.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle, \text{calculons la projection de } |\psi\rangle \text{ sur } |u_j\rangle :$$

$$\langle u_j|\psi\rangle = \sum_i c_i \langle u_j|u_i\rangle = \sum_i c_i \delta_{ij} = c_j$$

$$\text{D'où} : |\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle |u_i\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i\|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \left[\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right]|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad 1I = \left[\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\right] :$$

C'est la relation de fermeture

Relations de fermeture en notation de Dirac- cas continu

- Un ensemble continu $\{|v_\alpha>\}$, de kets constitue une base si tout ket $|\psi>$ de x peut être développé d'une façon et d'une seule suivant les $\{|v_\alpha>\}$.

$$|\psi\rangle = \int c(\alpha)|v_\alpha\rangle d\alpha, \text{calculons la projection de } |\psi\rangle \text{ sur } |v_{\alpha'}\rangle :$$

$$\langle v_{\alpha'}|\psi\rangle = \int c(\alpha)\langle v_{\alpha'}|v_\alpha\rangle d\alpha = \int c(\alpha)\,\delta(\alpha-\alpha')\,d\alpha = c(\alpha')$$

$$\text{D'où} : |\psi\rangle = \int c(\alpha)|v_\alpha\rangle d\alpha = \int \langle v_\alpha|\psi\rangle |v_\alpha\rangle d\alpha$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \int |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle d\alpha$$

$$\Leftrightarrow \quad |\psi\rangle = \left[\int |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| d\alpha\right]\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow \quad 1I = \left[\int |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| d\alpha\right] :$$

C'est la relation de fermeture

1I désigne l'opérateur identité dans ξ

Equation de Schrodinger avec la notation de Dirac:

Equation dépendante du temps:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|\psi\right\rangle = H\left|\psi\right\rangle$$

Equation indépendante du temps:

$$H\left|\phi\right\rangle = E\left|\phi\right\rangle$$

V- Représentation de A par une matrice «carrée»

1- Définition :

On peut définir les opérateurs linéaires dans ξ comme on l'a fait dans L^2 (paragraphe II).

Supposons qu'à chaque ket $|\psi>$ de ξ corresponde un certain ket $|\psi'>$ de ξ. On dira que $|\psi'>$ résulte de l'action d'un opérateur A sur $|\psi>$.

Si de plus cette correspondance est linéaire, l'opérateur A ainsi défini est un opérateur linéaire:

$$A|\psi> = |\psi'>$$

2- Propriétés et opérations :

i) A est nul si $|\psi'\rangle = 0$, quel que soit $|\psi\rangle$:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = 0$$

ii) A et B sont égaux si $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|B|\psi\rangle$

iii) Si la correspondance entre $|\psi\rangle$ et $|\psi'\rangle$ est biunivoque, elle définit deux opérateurs linéaires A et B : $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$ et $|\psi\rangle = B|\psi'\rangle$

A et B sont alors par définition inverses l'un de l'autre.

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle = A(B|\psi'\rangle)$$

$$|\psi\rangle = AB|\psi\rangle$$

$$AB = 1$$

- **iv)** La somme des opérateurs linéaires est commutative et associative :

$$A + B = B + A$$

$$A + (B + C) = (A + B) + C$$

- **v)** Le produit est associatif et distributif par rapport à l'addition :

$$A(BC) = (AB)C$$

$$A(B + C) = AB + AC$$

- **vi)** Le produit n'est pas commutatif (en général)

$AB - BA = [A,B]$ commutateur

Si $[A,B] = 0$: on dit que A et B commutent.

- **Opérations** :

i) Soit λ un nombre complexe et A un opérateur

$\lambda_1 A_1|\psi_1\rangle = A_1(\lambda_1|\psi_1\rangle)$

$\langle\psi_2|A_2\lambda_2 = \lambda_2 \langle\psi_2|A_2$

ii) A, B deux opérateurs tel que : $S = A + B$

$S|\psi\rangle = (A + B)|\psi\rangle$

$= A|\psi\rangle + B|\psi\rangle$

$\langle\psi|S = \langle\psi|A + \langle\psi|B$

iii) $P = AB$

$P|\psi\rangle = (AB)|\psi\rangle = A(B|\psi\rangle) = A|\psi'\rangle = |\psi''\rangle$

$\langle\psi|P = \langle\psi|(AB) = (\langle\psi|A)B = \langle\psi_1|B = \langle\psi_2|$

Remarques :

- On dit aussi que A et B sont inverses l'un de l'autre si $AB = BA = 1$

car $|\psi\rangle = B|\psi'\rangle = B(A|\psi\rangle)$

$|\psi\rangle = BA|\psi\rangle \Leftrightarrow 1 = BA$

$AB = BA = 1 \Leftrightarrow [A,B] = 0$

- L'inverse d'un opérateur A n'existe pas toujours. Lorsqu'il existe, on le note A^{-1}.

- Si deux opérateurs A, C possèdent chacun un inverse, le produit AC possède un inverse tel que : $(AC)^{-1} = C^{-1}A^{-1}$.

3- Représentation matricielle d'un opérateur :

On a vu que : $|\psi\rangle = \Sigma\, C_i\, |U_i\rangle$

où $\{|U_i\rangle\}$ forme une base orthonormée complète dans ξ.

Appliquons un opérateur A à $|\psi\rangle$ tel que :

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i\,|u_i\rangle \quad \text{et} \quad |\psi'\rangle = \sum_j c_j'\,|u_j\rangle$$

$$c_j' = \langle u_j|\psi'\rangle = \sum_i c_i \langle u_j|A|u_i\rangle = \sum_i c_i A_{ji}$$

$$c_1' = c_1 A_{11} + c_2 A_{12} + c_3 A_{13} + \ldots + c_n A_{1n}$$

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$\Leftrightarrow$$

$$\begin{pmatrix} c_1' \\ c_2' \\ . \\ . \\ c_n' \\ . \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \ldots & A_{1n} & .. \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \ldots & A_{2n} & .. \\ . & & & & & \\ . & & & & & \\ A_{n1} & A_{n2} & A_{n3} & \ldots & A_{nn} & .. \\ . & & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ . \\ c_n \\ . \end{pmatrix}$$

4- Calcul de $<\psi_2|A|\psi_1>$:

$$|\psi_1\rangle = \sum_i a_i |u_i\rangle \quad \text{et} \quad |\psi_2\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle$$

$$\langle\psi_2|A|\psi_1\rangle = \sum_i \sum_j a_i b_j^* \langle u_j|A|u_i\rangle = \sum_i \sum_j a_i b_j^* A_{ji}$$

5- Exemple d'opérateur linéaire : opérateur de projection ou projecteur :

Soit $|\psi>$ appartenant à ξ tel que $<\psi|\psi> = 1$

$<\psi|$ de ξ^*. On définit l'opérateur projecteur par :

$$P_\psi = |\psi> <\psi|$$

i- $P_\psi |\psi_1> = (|\psi> <\psi|) |\psi_1>= |\psi> <\psi|\psi_1> = \lambda |\psi>$

ii- $P^2_\psi = P_\psi P_\psi = (|\psi> <\psi|) (|\psi> <\psi|) = |\psi> <\psi|\psi> <\psi|$

$= |\psi> <\psi|= P_\psi$

D'où: une projection est équivalente à deux projections.

VI- Opérateurs adjoints :

1- Définition :

Deux opérateurs A et B sont dits adjoints l'un de l'autre si leurs matrices représentatives (dans un représentation bien définie) sont adjointes l'une de l'autre.

Notation: L'adjoint de A est noté A^+ et l'adjoint de B est noté B^+.

$$A_{ij} = \langle u_i|A|u_j\rangle$$

$$A_{ji}^* = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$$

$$\langle u_i|A^+|u_j\rangle = \langle u_j|A|u_i\rangle^*$$

Exemple 2 matrices adjointes l'une de l'autre :

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 \\ a_3 & a_4 \end{pmatrix}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} a_1^* & a_3^* \\ a_2^* & a_4^* \end{pmatrix}$$

D'une manière générale, l'adjoint A^+ de A est défini par :

$$<\psi_2|A^+|\psi_1> = (<\psi_1|A|\psi_2>)^*$$

2- Propriétés :

Soit λ un nombre complexe. A et B sont des opérateurs.

- **i) $(\lambda A)^+ = (\lambda A)^{*T}$ conjugué du transposé**
  $= \lambda^{*T} A^{*T} = \lambda^* A^+$
- **ii) $(A + B)^+ = A^+ + B^+$**
- **iii) $(AB)^+ = B^+A^+$**
- **iv) $(A^+)^+ = A$**
- **v) Un opérateur A est dit unitaire s'il est l'inverse de son propre adjoint : $AA^+ = A^+A = 1$**
  Le produit C = AB (tel que A,B soient unitaires) est aussi unitaire.

- **Règle importante** :
  Pour obtenir l'expression adjointe d'une expression quelconque (contenant des nombres complexes, des opérateurs, des ket et bra), on procède de la façon suivante :
  i) On inverse l'ordre des termes.
  ii) Les bra deviennent ket et les ket deviennent bra.
  Les complexes deviennent complexes conjugués et les opérateurs deviennent opérateurs adjoints.

- **Exemple** :
  Soit: λ un nombre complexe.
  A, B, C et D sont des opérateurs. $|\psi_1>$ et $<\psi_2|$

  $\lambda\, ABCD\, |\psi_1><\psi_2|$ a pour expression adjointe :

  $$|\psi_2><\psi_1|\, D^+C^+B^+A^+\, \lambda^*$$

VII/ Opérateur hermitique (ou auto-adjoint) :

- **1- Définition** :

  A est hermitique si $A^+ = A$

  Dans $|U_i>$: $A^*_{ij} = A^*_{ji} = A_{ij}$

- **2- Exemples:**

  a) $P_\psi = |\psi><\psi|$

  $P^+_\psi = (|\psi><\psi|)^+$

  $= |\psi><\psi| = P_\psi$

  L'opérateur projecteur est hermitique.

  b)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix} \text{ et } A^+ = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 2 \end{pmatrix} : A = A^+$$

- **3- Définition** :

  B est dit anti-hermitique si : $B^+ = -B$

- **Conséquences** :

  Un opérateur quelconque peut être écrit (et d'une seule façon) sous la forme d'une somme d'opérateurs hermitique et anti-hermitique.

$$A = H_A + I_A$$

$$\text{Où } H_A = \frac{A + A^+}{2} \text{ et } I_A = \frac{A - A^+}{2}$$

$$\text{On a} : H_A^+ = H_A \quad \text{et } I_A^+ = -I_A$$

- Toute combinaison linéaire à coefficients réels d'opérateurs hermitiques est hermitique.

- Le produit AB de deux opérateurs hermitiques n'est pas nécéssairement hermitique.

$$(AB)^+ = B^+A^+ = BA$$

- si BA = AB : A et B commutent, alors $(AB)^+ = AB$

Remarque:

$$AB = \frac{AB+BA}{2} + \frac{1}{2}[A,B]$$

VIII/ Problème de valeurs propres :

- **1- Définition :**

  Soit A un opérateur linéaire. Par définition, on dira que le nombre complexe a_n est valeur propre de A associé au vecteur propre $|\psi_n\rangle$ si : $A|\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$

- **Exemple :**

  $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ équation de Schrödinger

  De même $\langle\psi'_n|A = a'_n \langle\psi'_n|$

- Soit $|\psi_n\rangle$ un vecteur propre $\mathbf{V_p}$ de A avec la v_p a_n .

  soit λ un complexe.

  $\lambda |\psi_n\rangle$ est aussi $\mathbf{V_p}$ de A avec la même v_p a_n.

$$A|\lambda|\psi_n\rangle = \lambda(A |\psi_n\rangle)$$
$$= \lambda(a_n |\psi_n\rangle) = a_n (\lambda |\psi_n\rangle)$$

- Si $<\psi_n| \lambda^* \lambda | \psi_n> = 1$

  $\lambda^* \lambda < \psi_n| \psi_n> = 1$

  $\lambda^* \lambda = 1$

  $\lambda = e^{i\theta}$: facteur de phase

  Si deux $\mathbf{V_p}$ ne diffèrent que par un facteur de phase, ils représentent le même état quantique.

- **2- Dégénérescence** :

  S'il existe plusieurs kets propres linéairement indépendants relatifs à la même valeur propre a_n, toute combinaison linéaire de ces kets est aussi ket propre de l'opérateur A relatif à la même v_p a_n.

  En d'autres termes, l'ensemble des kets propres de A (relatifs à une valeur propre donnée a_n) forme un espace vectoriel que l'on appelle sous espace relatif à la v_p a_n.

  Distinguons deux cas :

  a) Si ce sous espace n'a qu'une dimension, on dira que la v_p a_n n'est pas dégénérée. En effet, à une v_p correspond un $\mathbf{V_p}$ seul .

  b) Si ce sous espace est de dimension g_n, on dira que la v_p est **dégénérée** g_n fois.

  g_n est appelé ordre de dégénérescence de la v_p a_n.

  $$\mathbf{A|\psi_{in}> = a_n \,|\, \psi_{in} >} \qquad \textbf{où } \mathbf{i = 1, 2, \ldots g_n}$$

- 3- **Remarques** :

a) g_n peut être infini.

b) Le texte énoncé en 2) est valable aussi pour les bra propres de A.

c) Si A est un opérateur quelconque, il n'existe pas de relation simple entre le problème de valeurs propres relatif aux ket et celui relatif aux bra.

Par contre, ces deux problèmes sont étroitement liés si A hermitique, ce qui est un cas d'interêt pratique. En effet, si A est hermitique ($A = A^+$), on a :

i) Les deux spectres de v_p de A sont identiques.

Langage: L'ensemble des v_p d'un opérateur A est appelé spectre de A.

ii) Toutes les v_p sont réelles. En effet : $A = A^+$ et

$A|\psi_n> = a_n \,|\, \psi_n >$ et $< \psi_n |A| \psi_n > = a_n < \psi_n|\psi_n >$

iii) Tout bra conjugué d'un ket propre de A est bra propre relatif à la même valeur propre et inversement.

Autrement dit, le sous espace des bra propres relatifs à une valeur propre donnée est le dual du sous espace des kets propres relatifs à la même v_p.

Les V_p relatifs à des v_p d'un opérateur hermitique sont orthogonales.

En effet, soit A opérateur hermitique $A = A^+$

Soient: $A|\psi_1> = a_1 \,|\, \psi_1 >$ et $A|\psi_2 > = a_2 \,|\psi_2 >$

avec a_1 différente de a_2

$$< \psi_2 |A = < \psi_2 |a_2 = a_2 < \psi_2 |$$

$$\Leftrightarrow \quad < \psi_2 |A| \psi_1 > = a_2 < \psi_2 | \psi_1 >$$

$$\Leftrightarrow \quad < \psi_2 |A| \psi_1 > = a_1 < \psi_2 | \psi_1 >$$

$$(a_2 - a_1) (< \psi_2 | \psi_1 >) = 0$$

Comme $(a_2 - a_1)$ est différent de zéro: $< \psi_2 | \psi_1 >) = 0$

$| \psi_1 >$ et $| \psi_2 >$ sont alors orthogonaux

4- Equation caractéristique d'un opérateur:

Soit un opérateur tel que : $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$.

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle$$

$$A|\psi\rangle = a\sum_i c_i |u_i\rangle \text{ et } A|\psi\rangle = \sum_i c_i A|u_i\rangle$$

On multiplie par le bra $\langle u_j|$, on obtient:

$$\left.\begin{array}{l} a\sum_i c_i \langle u_j|u_i\rangle = a\sum_i c_i \delta_{ji} \\ \text{et } \sum_i c_i \langle u_j|A|u_i\rangle = \sum_i c_i A_{ji} \end{array}\right) \sum_i c_i (A_{ji} - a\,\delta_{ji}) = 0$$

- Si i = 1, 2, …, n, on est en présence d'un système linéaire à n inconnues, il aura pour solution (autre que $C_i = 0$):

Det (A - a I) = 0

I est la matrice unité.

C'est l'équation caractéristique de l'opérateur A ou équation aux valeurs propres dont les solutions sont les v_p a.

IX/ Observables:

- **1- Définition** :

Une observable est un opérateur hermitique dont le système de $\mathbf{V_p}$ forme une base orthonormée complète dans l'espace des états.

$A|U^i_n\rangle = a_n\,|U^i_n\rangle$ $\quad\quad$ $i = 1, 2, \ldots, g_n$

(g_n degré de dégénérescence)

On a : $\langle U^i_n|U^i_{n'}\rangle = \delta_{nn'}$ $\quad\quad$ $i = 1, 2, \ldots, g_n$

A l'intérieur du sous espace de a_n (qu'on notera ξ_n), on peut choisir les $|U^i_n\rangle$ tel que : $\langle U^i_n|U^j_n\rangle = \delta_{ij}$

d'où:

$$\langle U^i_n|U^j_{n'}\rangle = \delta_{ij}\,\delta_{nn'}$$

- L'ensemble des $|U^i_n\rangle$ est complet :

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u^i_n\rangle\langle u^i_n| = 1$$

Soit P_n: projecteur sur le sous espace ξ_n

$$P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u^i_n\rangle\langle u^i_n|$$

$$\sum_n P_n = 1$$

2- Exemples d'observables :

a) Projecteur :

$P_\psi = |\psi> <\psi|$

b) Opérateur position X :

Soit $|\psi>$ de ξ tel que $X|\psi> = |\psi'>$ de ξ

Dans la représentation $\{|x>\}$ (base de Dirac),

X vérifie : $<x|X|\psi> = x<x|\psi> = x\ \psi(x)$

i) Montrer que X est hermitique :

$<\varphi|X|\psi> = <\psi|X|\varphi>^*$

ii) Chercher les v_p de X:

$X|x'> = \lambda|x'>$

$_x$ $<x|$ … $\lambda=x'$

Conclusion :

L'opérateur X appelé aussi opérateur position est donc une observable.

c) Opérateur impulsion P :

Soit $|\psi>$ de ξ tel que $P|\psi> = |\psi'>$ de ξ

1) Dans la représentation $\{|p>\}$: base de Fourier

$<p|P|\psi> = p <p|\psi>=p\ \psi(p)$

i) Montrer que P est hermitique :

$<\varphi|P|\psi> = <\psi|P|\varphi>^*$

ii) Chercher les v_p d P

2) Dans la représentation $\{|x>\}$

Calculons $<x|P|\psi>$ et introduisons la relation de fermeture:

$$\int |p\rangle\langle p|\ dp = 1$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int \langle x|p\rangle\langle \mathbf{p}|P|\psi\rangle dp$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,\mathbf{p}\,\langle \mathbf{p}|\psi\rangle dp$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int e^{\frac{ipx}{\hbar}}\,\mathbf{p}\,\psi(p)\,dp$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial\psi(x)}{\partial\mathbf{x}} = \frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}\langle x|\psi\rangle$$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \langle x|\frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}|\psi\rangle$$

$$\text{D'où : } P \rightarrow \frac{\hbar}{\mathbf{i}}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}$$

Conclusion: P est hermitique et {|p>} forme une base orthonormée et complète, alors l'opérateur impulsion P est une observable.

- **3- Fonctions d'observables** :

Soit A|ψ> = a|ψ> A est une observable

Toute fonction f(a) des valeurs propres a d'une observable A permet de définir un opérateur linéaire fonction de cette observable.

Par définition :

f(A) |ψ> = f(a) |ψ>

Remarques :

i) Si f est une fonction polynôme, cette définition coïncide avec celle que l'on obtient par application des règles de l'algèbre des opérateurs.

ii) Tout $\mathbf{V_p}$ de A est $\mathbf{V_p}$ de f(A).

iii) Cas de dégénérescence : les $\mathbf{V_p}$ de A relatifs à une même v_p a sont aussi $\mathbf{V_p}$ de f(A) avec la même v_p f(a).

- **Exemples** :

i) $e^A e^B \neq e^{A+B}$

ii) $e^A e^B = e^B e^A$ si $[A,B] = 0$

iii) $X|x\rangle = x|x\rangle$

iv) au potentiel V(x), on associe l'observable V(X)

$$V(X)|x\rangle = V(x)|x\rangle$$

et

$$\langle x'|V(X)|x\rangle = V(x) \langle x'|x\rangle = V(x)\, \delta(x' - x)$$

X/ Observables qui commutent et variables compatibles :

- Considérons deux observables A et B et supposons que le spectre des v_p est discret et qu'elles possèdent une fonction propre commune $|\psi_n\rangle$.

$$A|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle$$

$$B|\psi_n\rangle = b_n|\psi_n\rangle$$

Pour que ces deux équations soient vérifiées simultanément, une condition s'impose :

$$(AB - BA)\,|\psi_n\rangle = [A,B]\,|\psi_n\rangle = 0\,|\psi_n\rangle = 0$$

c'est-à-dire que le commutateur [A,B] a $|\psi_n\rangle$ comme $\mathbf{V_p}$ correspondant à une v_p nulle. En effet :

$AB|\psi_n> = A (B|\psi_n>)$

$= A (b_n|\psi_n>)$

$= b_n (A|\psi_n>) = b_n a_n|\psi_n>$

$BA|\psi_n> = B A|\psi_n> = B a_n|\psi_n> = a_n B|\psi_n> = a_n b_n|\psi_n>$

$(AB - BA) |\psi_n> = 0 = 0 |\psi_n>$

D'une manière générale, on a le théorème suivant : Si deux observables commutent, elles possèdent un système de base commun à A et B, et réciproquement.

- **Langage :**

  - Un système de base d'une observable donnée est tout système orthonormé complet de $\mathbf{V_P}$ de cette observable.

  - Les $\mathbf{V_P}$ qui diffèrent entre eux par un facteur de phase ne sont pas considérés comme distincts. Ils représentent le même état quantique.

- **Signification physique du théorème :**

  Les variables dynamiques représentées par ces deux observables qui commutent peuvent être définies de façon précise simultanément : ce sont des variables compatibles (ou variables simultanément mesurables).

- **Remarques** :

  X, P_x ne sont pas compatibles car $[X,P_x] = i\hbar$

- **Théorème 1** :

  Soient $|\psi_1>$ et $|\psi_2>$ deux vecteurs propres de A tel que :

  $A|\psi_1> = a_1|\psi_1>$

  avec $a_1 \neq a_2$

  $A|\psi_2> = a_2|\psi_2>$

  Si [A,B] = 0, alors $<\psi_2|B|\psi_1> = 0$

  En effet, calculons

  $<\psi_2|[A,B]|\psi_1> = <\psi_2|AB - BA|\psi_1>$

  $0 = <\psi_2|a_2B - Ba_1|\psi_1>$

  $= a_2 <\psi_2|B|\psi_1> - a_1 <\psi_2|B|\psi_1>$

  $= (a_2 - a_1) <\psi_2|B|\psi_1>$

  Or $a_1 \neq a_2$: $<\psi_2|B|\psi_1> = 0$

- **Théorème 2** :

  Si $|\psi^i{}_n>$ est **V_P** de A avec la v_p a_n, alors $B|\psi^i{}_n>$ est aussi **V_P** de A dans le cas où [A,B] = 0.

  Le sous espace ξ_n est invariant sous l'effet de B.

  ξ_n est l'espace de dégénérescence de a_n.

  En effet :

  $[A,B]\ |\psi^i{}_n> = 0$ car A et B commutent

  $A(B|\psi^i{}_n>) - B(A|\psi^i{}_n>) = 0$

  $A(B|\psi^i{}_n>) = a_n\ (B|\psi^i{}_n>)$

XI/ E.C.O.C : Ensemble Complet d'Observables qui Commutent:

- **1- Définition** :

  On dit qu'un ensemble A, B, C… d'observables forme un E.C.O.C si :

  i) les observables commutent toutes deux à deux : $[A,B] = [A,C] = [B,C] = \ldots = 0$

  ii) Si leur système de base commun est défini de façon unique.

  A chaque ensemble de v_p a,b,c… d'observables (A,B,C…), correspond **un et un seul V_p** commun (à un facteur de phase près).

Ce vecteur propre peut être regardé comme fonction des v_p a,b,c…

Ce vecteur est parfois noté |abc…> ou encore $|\psi_{abc\ldots}\rangle$

$A|_{abc\ldots}\rangle = a\,|_{abc\ldots}\rangle$

$A|\psi_{abc\ldots}\rangle = a\,|\psi_{abc\ldots}\rangle$

$B|_{abc\ldots}\rangle = b\,|_{abc\ldots}\rangle$

$C|_{abc\ldots}\rangle = c\,|_{abc\ldots}\rangle$

a) Cas d'une seule observable :

i) Si A est observable et si aucune des v_p n'est dégénérée, alors la donnée de la v_p détermine de manière unique les $\mathbf{V_p}$ correspondant.

A forme à elle seule un E.C.O.C.

$$A|\psi_n\rangle = a_n |\psi_n\rangle$$

A observable et a_n non dégénérée: A est un E.C.O.C

ii) Si a_n est dégénérée

$A|\psi^i_n\rangle = a_n |\psi^i_n\rangle$ $\quad$ $i = 1, 2, \ldots g_n$

A n'est pas un E.C.O.C.

b) Cas de deux observables :

Soient deux observables A, B tel que : $[A,B] = 0$.

Par diagonalisation de B dans le sous espace propre a_n. On détermine les $\mathbf{V_P}$ communs à A et B qu'on peut noter $\{|\psi_{n,p}\rangle\}$ ou $|np\rangle$, avec :

$A|\psi_{n,p}\rangle = a_n |\psi_{n,p}\rangle$ $\quad$ et $\quad$ $B|\psi_{n,p}\rangle = b_p |\psi_{n,p}\rangle$

i) Si à $\{a_n,b_p\}$ correspond un $\mathbf{V_P}$ unique, alors $\{A,B\}$ est un E.C.O.C.

ii) Si a_n est dégénérée (g_n: ordre de dégénérescence)

ou b_p est dégénérée (g_p: ordre de dégénérescence)

alors $\{A,B\}$ n'est pas un E.C.O.C.

On prend alors une 3ème observable C tel que : $[A,C] = [B,C] = 0$ et on la diagonalise dans $\xi_{n,p}$ ($\xi_{n,p}$ sous espace propre de b_p).

2- Remarques :

i) On convient généralement à former un E.C.O.C avec le minimum d'observables possibles, tel que si on enlève une observable, cet ensemble cesse d'être un E.C.O.C.

ii) Soit {A,B,C} trois observables formant un E.C.O.C tel que:

A $\longrightarrow$ v_p a_n, B $\longrightarrow$ v_p b_p et C $\longrightarrow$ v_p c_q

Le **V_P** commun et unique sera noté : $|\psi_{npq}>$ ou encore $|a_n b_p c_q>$

iii) Rôle des E.C.O.C dans la détermination de l'état quantique d'un système : connaître l'état quantique d'un système, c'est avoir fait sur le système le maximum de mesures compatibles.

Soit a_n une v_p dégénérée d'une observable A. L'état quantique du système n'est pas alors parfaitement connu. On fait intervenir une autre observable jusqu'à l'obtention de l'E.C.O.C.

Exemples :

a- Particule sur un axe ox :

$X|x> = x|x>$ X est l'observable position

X est un E.C.O.C car à chaque v_p correspond un seul vecteur propre $|x>$.

b- Particule dans le plan oxy :

$X|xy> = x|xy>$ où y est quelconque

X n'est pas un E.C.O.C car à chaque v_p correspond plusieurs vecteurs propres $|xy>$

c- {X,Y} est un E.C.O.C

A chaque {x,y} un seul vecteur propre $|xy>$

{X,Y} une observable position: suivant ox et suivant oy.

MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 5 :
Postulats de la mécanique quantique

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI



Introduction

Après avoir vu le formalisme mathématique de la mécanique quantique, nous allons énoncer ses postulats, qui sont valables pour tout système quantique y compris bien sûr la mécanique ondulatoire d'une particule dans l'espace.

Description quantique d'un système physique:
Etat du système, ses observables et son évolution dans le temps

1 er postulat
PRINCIPE DE SUPERPOSITION :

- L'état d'un système est entièrement défini, à chaque instant, par la donnée d'un vecteur ket $|\psi>$ appartenant à l'espace des états ξ_n.

  $|\psi>$ est équivalent à $\psi(x,t)$ qui est une fonction de carré sommable.

2 ème postulat
DESCRIPTION MATHEMATIQUE D'UNE GRANDEUR PHYSIQUE

- A toute grandeur physique mesurable A est associée un opérateur linéaire hermitique agissant dans l'espace des états.

$A=A^{+}: <\psi_1|A|\psi_2>= <\psi_2|A|\psi_1>^{*}$

Matrice ligne

Matrice colonne

Matrice carrée

A est l'observable associée à la grandeur physique A.

3ème postulat
MESURES DES GRANDEURS PHYSIQUES - PRINCIPE DE QUANTIFICATION :

- La mesure d'une grandeur physique A ne peut donner comme résultat que l'une des valeurs propres de l'opérateur correspondant à A.

Remarque :A étant une observable, ses valeurs propres sont donc réelles.

4ème postulat
DECOMPOSITION SPECTRALE :

- **Cas discret dégénéré:**

La probabilité P_{an} de trouver, lors de la mesure de l'observable A, la valeur propre a_n est :

$$P_{a_n} = \left| \frac{\sum_i < U_n^i | \psi >}{< \psi | \psi >} \right|^2$$

Avec

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} C_n^i \, |U_n^i\rangle$$

- g_n est le degré de dégénérescence.
- $\{|U_n^i>\}$ un système orthonormé de vecteurs formant une base dans le sous-espace propre de ξ_n associé à la valeur propre a_n .

$$P_{a_n} = \sum_i \left|C_n^i\right|^2$$

Notons que la probabilité totale est égale à l'unité:

$$\sum_n P_{a_n} = 1$$

- Cas d'un spectre continu et non dégénéré:

Lorsqu'on mesure la grandeur physique A sur un système quantique se trouvant dans L'état normé $|\psi>$, la probabilité dP_a d'obtenir une valeur comprise entre a et a+da est:

$$dP_a=|<V_\alpha|\psi>|^2 \, da$$

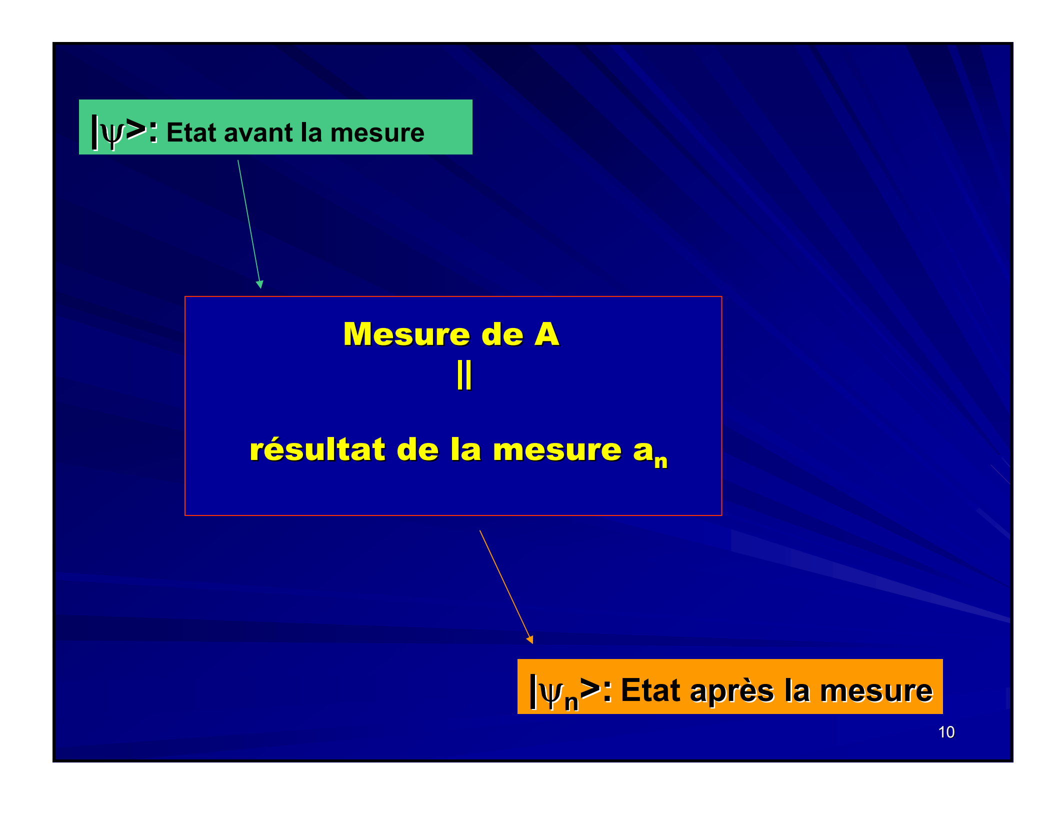
Où $|V_\alpha>$ est le vecteur associé à la valeur propre a de l'observable A .

5 ème postulat
REDUCTION DU PAQUET D'ONDES

- Si la mesure de l'observable A sur le système dans l'état $|\psi>$ donne la valeur propre a_n , alors l'état du système immédiatement après la mesure ayant donné la valeur a_n est la projection normée de $|\psi>$, soit :

$$\frac{P_n|\psi>}{\left[<\psi|P_n|\psi>\right]^{1/2}}$$

Remarque: Il est impossible de prévoir à l'avance avec certitude vers quel état quantique le système va passer. On ne peut que faire des prévisions statistiques : C'est le concept d'indéterminisme.



6 ème postulat
EVOLUTION DES SYSTEMES DANS LE TEMPS :

- L'évolution du vecteur ket $|\psi>$ dans le temps est donnée par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial |\psi>}{\partial t} = H |\psi>$$

Opérateur d'évolution

- Soit un système physique décrit par un ket $|\psi>$.
  On définit l'opérateur $U(t,t_0)$ qui permet de déterminer $|\psi(t)>$ à partir de $|\psi(t_0)>$:

$$|\psi(t)> = U(t,t_0)\,|\psi(t_0)>$$

On montre aisément que:

- $U(t_0,t_0)=1$
- $U(t,t_1)\,U(t_1,t_0)= U(t,t_0)$
- $U(t,t')\,U(t',t)= 1$
- A partir de l'équation de Schrödinger, on montre que:

$$U(t,t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')\,U(t',t_0)\;dt'$$

- **Cas particulier d'un système stationnaire :**

  H indépendant explicitement du temps.

  $H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$ (cas stationnaire).

  Supposons pour simplifier les écritures que les valeurs propres E_n ne sont pas dégénérées.

  L'ensemble des $|\psi_n\rangle$ forme une base suivant laquelle on peut développer n'importe quel vecteur $|\psi\rangle$.

  a) Soit à $t = t_0$: $|\psi(t_0)\rangle = C_n(t_0) \; |\psi_n\rangle$

  où $C_n(t_0) = \langle\psi_n|\psi(t_0)\rangle$

  b) A l'instant t : $|\psi(t)\rangle = C_n(t)|\psi_n\rangle$

  On montre que :

$$\left|\psi(t)\right\rangle = \sum_n C_n(t_0)\exp\left(-i\frac{E_n}{\hbar}(t-t_0)\right)\left|\psi_n\right\rangle$$

THEOREME D'EHRENFEST :

- Il traduit l'évolution de la valeur moyenne d'une observable au cours du temps ($\langle\psi|\psi\rangle = 1$):

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\left(\langle\psi|A|\psi\rangle\right) = \left\langle\frac{dA}{dt}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A,H]\rangle$$

CONSTANTE DU MOUVEMENT :

Une observable A est dite constante du mouvement si:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \left\langle\frac{dA}{dt}\right\rangle = 0 \text{ et } [A,H] = 0$$

Remarque :

$[A,H] = 0$: il existe donc un système de vecteurs propres communs à A et H (d'après le chapitre 4).

Soit les $|\psi_n>$ cet ensemble de vecteurs propres:

$A|\psi_n> = a_n |\psi_n>$ et $H|\psi_n> = E_n |\psi_n>$

Comme les $|\psi_n>$ sont des états stationnaires :

à t_0, la mesure de A donne a_n

à t_0, la mesure de H donne E_n

à t_1, la mesure de A donne a_n

à t_i, la mesure de A donne a_n

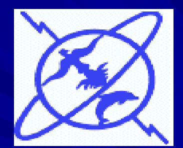
à t_j, la mesure de H donne E_n

La valeur propre a_n est appelée **bon nombre quantique**:

$$\frac{dP_{a_n}}{dt} = 0$$

MECANIQUE QUANTIQUE
Chapitre 6 :
Oscillateur Harmonique Quantique

Pr. M. ABD-LEFDIL
Université Mohammed V- Agdal
Faculté des Sciences
Département de Physique
Année universitaire 06-07
Filières SM-SMI



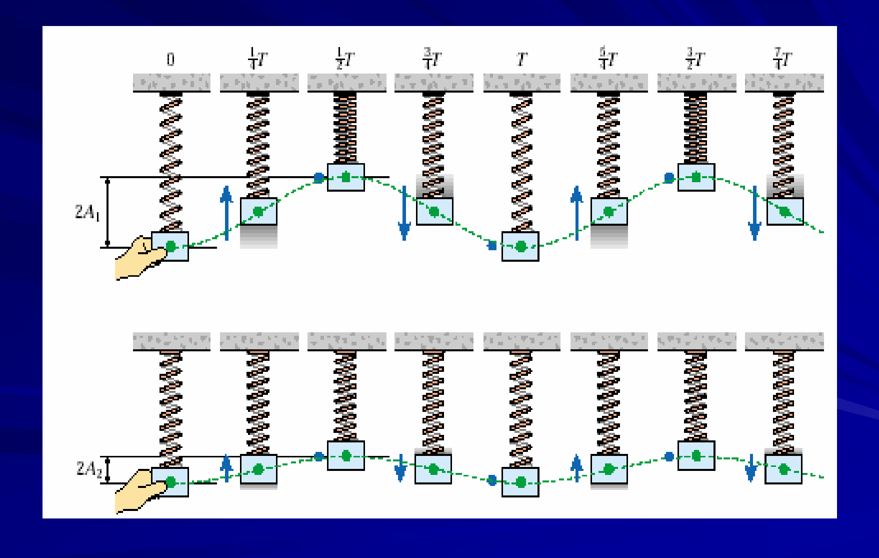
Introduction

L'oscillateur harmonique classique a été étudié de manière détaillée en S.1 où l'énergie mécanique du système s'écrivait comme :

$$E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}Kx^2 \qquad (1)$$

m étant la masse du point matériel (ou particule), ω sa pulsation, x son déplacement par rapport à la position d'équilibre et p_x sa quantité du mouvement.

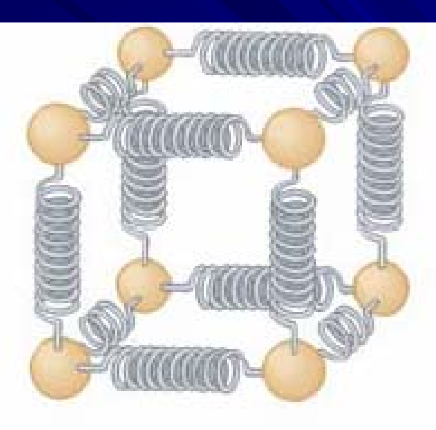
Exemple: masse accrochée à un ressort.



Dans ce chapitre, on se propose de faire une étude quantique de l'oscillateur harmonique.

Exemple O. H. Q. :
Vibrations des atomes dans les solides.

Imaginons un système que l'on écarte légèrement de sa position d'équilibre, par exemple une molécule diatomique d'acide chlorhydrique HCl.
Si l'on éloigne les atomes de H et Cl, une force de rappel va essayer de remettre la molécule dans la position d'équilibre.



c'est une façon schématique de représnter les liaisons chimiques dans un matériau. les atomes sont liés entre eux par des ressorts et qui oscillent autour de leur position d'équilibre.

Dans ce cas, les grandeurs classiques x et p_x sont remplacées respectivement par les observables X et P_x (principe de correspondance).

Rappelons que X et P_x sont deux observables qui ne commutent pas (Chapitre n° 2):

$$\left[X, P_x\right] = i\hbar \qquad (2)$$

Ainsi, l'opérateur hamiltonien du système est donné par :

$$H = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{1}{2} K X^2 \qquad (3)$$

On remarque que H est indépendant du temps: le système est stationnaire. Par conséquent, l'étude quantique de l'oscillateur harmonique se ramène à la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \qquad (4)$$

Dans la représentation {|x>} (base de Dirac):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\phi(x)=E\phi(x) \qquad (5)$$

Revenons à l'équation (3) et introduisons les opérateurs suivants:

$$\hat{X}=\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}X \qquad (6) \qquad \hat{P}_x=\frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}}P_x$$

On remarque que les observables $\hat{X}$ et $\hat{P}_x$ sont sans dimension et on a:

$$\left[\hat{X},\hat{P}_x\right]=i \qquad (7)$$

L'hamiltonien (3) devient:

$$H=\hbar\omega\,\hat{H} \qquad (8) \qquad \hat{H}=\frac{1}{2}\left[\hat{X}^2+\hat{P}_x^2\right]$$

- Le problème est donc de chercher les solutions de l'équation :

$$\hat{H}|\phi_n\rangle=\varepsilon_n|\phi_n\rangle \qquad (9)$$

où les valeurs propres ε_n sont sans dimension.

On définit deux opérateurs par:

$$a=\frac{\hat{X}+i\hat{P}}{\sqrt{2}} \qquad (10) \qquad a^+=\frac{\hat{X}-i\hat{P}}{\sqrt{2}}$$

On vérifie aisément que les deux opérateurs a^+ et a sont adjoints l'un de l'autre.

a^+ et a ne sont pas hermitiques.

Calculons a a^+:

$$a^+a = \left[\frac{\hat{X} - i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right]\left[\frac{\hat{X} + i\hat{P}}{\sqrt{2}}\right] = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \hat{P}_x^2 + i\left[\hat{X}, \hat{P}\right]\right)$$

$$\Leftrightarrow \quad a^+a = \frac{1}{2}\left(\hat{X}^2 + \hat{P}_x^2 - 1\right)$$

En comparant avec l'expression **(8)**, on voit que :

$$\hat{H} = \mathbf{a}^+a + \frac{1}{2} \quad \textbf{(11)}$$

On définit l'opérateur nombre de particules par : $N = a^+a$

N est hermitique car : $N^+ = (a^+a)^+ = (a)^+ (a^+)^+ = a^+a = N$

$$\hat{H} = \mathbf{N} + \frac{1}{2} \quad \textbf{(12)}$$

On montre facilement que :

$[a , a^+] = 1$; $[N , a] = - a$; $[N , a^+] = a^+$ **(13)**

$[N , a] = - a$, en effet:
$N a – a N = a^+a\, a - a\, a^+a = (a^+a - a\, a^+)a = (-[a , a^+])\, a = - a$

$[N , a^+] = a^+$, en effet:
$Na^+ – a^+N = a^+a\, a^+ - a^+\, a^+a = a^+(aa^+ - a^+a) = a^+\, [a , a^+] = a^+$

VECTEURS PROPRES ET VALEURS PROPRES DE N :

- Soit : $N|\phi_n\rangle = n|\phi_n\rangle$ (14)

$H = \hbar\omega \hat{H}$

(8)

D'où: $H|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$

$\hat{H} = \mathbf{N} + \frac{1}{2}$

(12)

Avec

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$$ (15)

Interprétations des opérateurs a+ et a :

- **i)** On a vu que: [N , a] = - a

$$[N,a]|\phi_n\rangle = -a|\phi_n\rangle$$

$\Leftrightarrow$

$$(Na - aN)|\phi_n\rangle = -a|\phi_n\rangle$$
$$N(a|\phi_n\rangle) = (n-1)(a|\phi_n\rangle)$$

Et $$H(a|\phi_n\rangle) = (E_n - \hbar\omega)(a|\phi_n\rangle)$$

L'application de l'opérateur a au $\mathbf{V_p}$ $|\Phi_n>$ fait <u>**baisser**</u> l'énergie d'une quantité $\hbar\omega$ qui est un quantum d'énergie. Pour cette raison:
a est appelé opérateur d'annihilation.

- **ii)** On a vu que: $[N , a^+] = a^+$.
  Comme dans i), on montre que:

$$H(a^+|\phi_n\rangle = (E_n + \hbar\omega)(a^+|\phi_n\rangle)$$

L'application de l'opérateur a^+ au **Vp** $|\Phi_n >$ fait **augmenter** l'énergie d'une quantité $\hbar\,\omega$ qui est un quantum d'énergie. Pour cette raison:
a^+ est appelé opérateur de création.

LEMME : Les valeurs propres n de N sont des entiers naturels n. En effet:

La norme au carré de $a|\Phi_n >$ (qui est $\mathbf{V_p}$ de N et de H) est donnée par :

$$\langle\phi_n|a^+a|\phi_n\rangle = \langle\phi_n|N|\phi_n\rangle = n\langle\phi_n|\phi_n\rangle \geq \mathbf{0}$$

Donc:

$$n \geq \mathbf{0}$$

Supposons que n soit non entier. On montrera que ceci est en contradiction avec le lemme énoncé plus haut.

Soit p un entier supérieur ou égal à zéro tq:

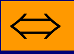
$n - p > 0$ et $n-p-1 < 0$

On a la relation : **$N (a^p|\Phi_n >) = (n - p)\ (a^p|\Phi_n >)$** pour tout entier naturel p.

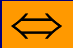
(**Relation facile à vérifier pour p= 0, 1, 2, ...**)

Démonstration:

$[N,a^p]=p\ a^{p-1}\ [N,a]$ (**T.D. n° 4 ex. 1**)



$N\ a^p - a^p\ N=p\ a^{p-1}\ (-a)= - p\ a^p$



$N\ a^p = (n-p)\ a^p$

Aussi: $N (a^{p+1}|\Phi_n >) = (n-p-1)\ (a^{p+1}|\Phi_n >)$

Or $n-p-1 < 0$ à cause de l'hypothèse de départ.

Si n n'est pas un entier, construire un vecteur propre non nul de N avec une valeur propre négative est en contradiction avec le lemme ci-dessus.

- **Cas particulier:**

$$\langle \phi_n | a^+ a | \phi_n \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad n = \mathbf{0} \ \ \mathbf{et} \ \ a|\phi_0\rangle = 0$$

Multiplions a^+ par $a\,|\Phi_0> = 0$, on obtient :

$$a^+ a|\phi_0\rangle = N|\phi_0\rangle = 0|\phi_0\rangle$$

n=0: C'est l'état fondamental où: $E_0 = \dfrac{\hbar\omega}{2}$

$$a|\phi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{X} + i\hat{P}\right)|\phi_0\rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}X + i\frac{1}{\sqrt{m\,\omega\,\hbar}}P_x\right)|\phi_0\rangle = 0$$

En représentation {|x>} (Base de Dirac):

$$\left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\langle x|X|\phi_0\rangle + i\frac{1}{\sqrt{m\,\omega\,\hbar}}\langle x|P_x|\phi_0\rangle\right) = 0 \quad \Leftrightarrow$$

$$\left(\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,x\,\phi_0(x) + i\frac{1}{\sqrt{m\,\omega\,\hbar}}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\phi_0(x)}{\partial x}\right) = 0$$

Multiplions par $\sqrt{\dfrac{m\omega}{\hbar}}$ on obtient :

$$\left(\frac{m\,\omega}{\hbar}\,x\,\phi_0(x) + \frac{d\phi_0(x)}{dx}\right) = 0$$

Et

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp -\left(\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\right)$$

- On montrera en T.D. que:

$$a|\phi_n\rangle = \sqrt{n}|\phi_{n-1}\rangle$$

$$a^+|\phi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\phi_{n+1}\rangle$$

$$|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|\phi_0\rangle$$

Dans la représentation {|x>} les $|\Phi_n\rangle$ s'expriment par :

$$\langle x|\phi_n\rangle = \phi_n(x)$$

et

$$\langle x|\phi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\langle x|(a^+)^n|\phi_0\rangle$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,X - i\frac{P}{\sqrt{\hbar\,m\,\omega}}\right] \Leftrightarrow$$

$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\sqrt{\frac{m\,\omega}{\hbar}}\,X - \sqrt{\frac{\hbar}{m\,\omega}}\frac{\partial}{\partial x}\right]$$

- Par conséquent:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}\right]^n \phi_0(x)$$

- Comme:

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp -\left(\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2}\right)$$

Alors:

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{\frac{3}{2}}\left[\frac{m\omega}{\hbar}x - \frac{d}{dx}\right]^n e^{\frac{-m\omega}{2\hbar}x^2}$$

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{\alpha^2}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{-\alpha^2}{2}x^2} H_n(\alpha x)$$

Avec:

$$\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$

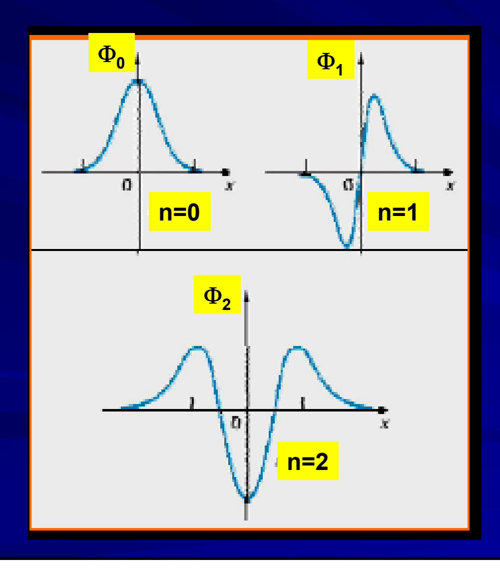
et

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)$$

$H_n(x)$ est le polynôme d'Hermite

$H_0(x)= 1$
$H_1(x)= 2x$
$H_2(x)= 4x^2 - 2$
$H_3(x)= 8x^3 - 12x$

Ci-dessous, nous présentons les fonctions d'ondes associées aux trois premiers niveaux de l'oscillateur harmonique en mécanique quantique (n = 0, 1, 2).



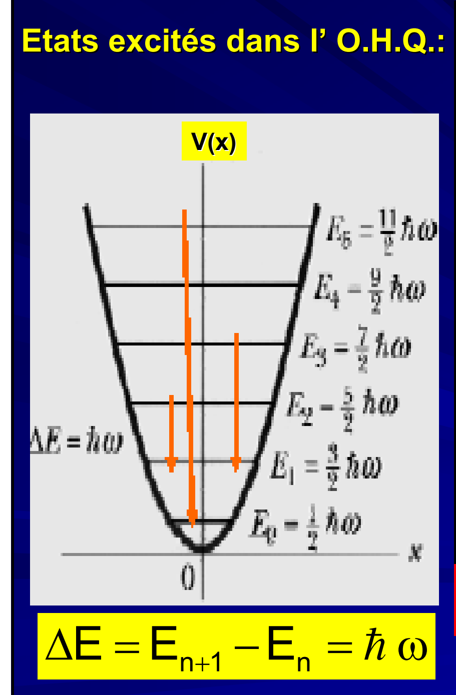
n= 0: état fondamental
n= 1: 1[er] état excité
n= 2: 2[ème] état excité

Le nombre de zéros dans Φ_n (x) est égal à n, en effet:

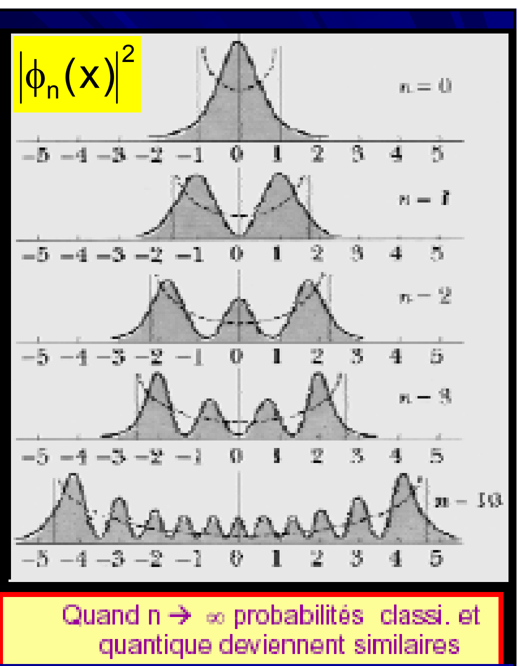
Φ_0 (x) ne s'annule jamais
Φ_1 (x) s'annule 1 fois
Φ_2 (x) s'annule 2 fois

Φ_p (x) s'annule p fois.

Etats excités dans l' O.H.Q.:



$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\,\omega$$



Quand n → ∞ probabilités classi. et quantique deviennent similaires

Remarques

i) L'intervalle dans lequel les Φ_n (x) prennent des valeurs appréciables augmente avec n. Ce qui correspond en mécanique classique à l'augmentation de l'amplitude avec l'énergie mécanique.

